THÈSE

présentée

A L'UNIVERSITÉ SCIENTIFIQUE ET MÉDICALE DE GRENOBLE

pour obtenir

LE TITRE DE DOCTEUR DE 3e CYCLE EN PHYSIQUE NUCLÉAIRE

PAR

Paul LECOQ

SUJET

Analyse de traces d'éléments par spectroscopie de rayons X caractéristiques

---

Soutenue le 18 Décembre 1973, devant la Commission d'Examen

JURY

M. J. VALENTIN — *Président*

Mme N. LONGEQUEUE, M. J. M. LOISEAUX — *Examinateurs*

THÈSE

présentée

A L'UNIVERSITÉ SCIENTIFIQUE ET MÉDICALE DE GRENOBLE

pour obtenir

LE TITRE DE DOCTEUR DE 3e CYCLE EN PHYSIQUE NUCLÉAIRE

PAR

Paul LECOQ

SUJET

Analyse de traces d'éléments par spectroscopie de rayons X caractéristiques

---

Soutenue le 18 Décembre 1973, devant la Commission d'Examen

JURY

M. J. VALENTIN — *Président*

Mme N. LONGEQUEUE, M. J. M. LOISEAUX — *Examinateurs*

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

UNIVERSITE SCIENTIFIQUE
ET MEDICALE DE GRENOBLE

LISTE DES PROFESSEURS

Président : Monsieur Michel SOUTIF
Vice-Président : Monsieur Gabriel CAU

PROFESSEURS TITULAIRES

MM.	ANGLES D'AURIAC Paul	Mécanique des fluides
	ARNAUD Georges	Clinique des maladies infectieuses
	ARNAUD Paul	Chimie
	AUBERT Guy	Physique
	AYANT Yves	Physique approfondie
Mme	BARBIER Marie-Jeanne	Electrochimie
MM.	BARBIER Jean-Claude	Physique expérimentale
	BARBIER Reynold	Géologie appliquée
	BARJON Robert	Physique nucléaire
	BARNOUD Fernand	Biosynthèse de la cellulose
	BARRA Jean-René	Statistiques
	BARRIE Joseph	Clinique chirurgicale
	BEAUDOING André	Pédiatrie
	BENOIT Jean	Radioélectricité
	BERNARD Alain	Mathématiques Pures
Mme	BERTRANDIAS Françoise	Mathématiques Pures
MM.	BESSON Jean	Electrochimie
	BEZES Henri	Chirurgie générale
	BLAMBERT Maurice	Mathématiques Pures
	BOLLIET Louis	Informatique (IUT B)
	BONNET Georges	Electrotechnique
	BONNET Jean-Louis	Clinique ophtalmologique
	BONNETAIN Lucien	Chimie minérale
	BONNET-EYMARD Joseph	Pathologie médicale
	BONNIER Etienne	Electrochimie Electrométallurgie
	BOUCHERLE André	Chimie et Toxicologie
	BOUCHEZ Robert	Physique nucléaire
	BOUSSARD Jean-Claude	Mathématiques Appliquées
	BRAVARD Yves	Géographie
	BRISSONNEAU Pierre	Physique du Solide
	BUYLE-BODIN Maurice	Electronique
	CABANAC Jean	Pathologie chirurgicale
	CABANEL Guy	Clinique rhumatologique et hydrologie
	CALAS François	Anatomie
	CARRAZ Gilbert	Biologie animale et pharmacodynamie
	CAU Gabriel	Médecine légale et Toxicologie
	CAUQUIS Georges	Chimie organique
	CHABAUTY Claude	Mathématiques Pures
	CHARACHON Robert	Oto-Rhino-Laryngologie
	CHATEAU Robert	Thérapeutique
	CHENE Marcel	Chimie papetière
	CHIBON Pierre	Biologie animale
	COEUR André	Pharmacie chimique
	CONTAMIN Robert	Clinique gynécologique
	COUDERC Pierre	Anatomie Pathologique
	COUMES André	Radioélectricité
	CRAYA Antoine	Mécanique
Mme	DEBELMAS Anne-Marie	Matière médicale
MM.	DEBELMAS Jacques	Géologie générale
	DEGRANGE Charles	Zoologie
	DEPORTES Charles	Chimie minérale
	DESRE Pierre	Métallurgie
	DESSAUX Georges	Physiologie animale

UNIVERSITE SCIENTIFIQUE
ET MEDICALE DE GRENOBLE

LISTE DES PROFESSEURS

Président : Monsieur Michel SOUTIF
Vice-Président : Monsieur Gabriel CAU

PROFESSEURS TITULAIRES

MM.	ANGLES D'AURIAC Paul	Mécanique des fluides
	ARNAUD Georges	Clinique des maladies infectieuses
	ARNAUD Paul	Chimie
	AUBERT Guy	Physique
	AYANT Yves	Physique approfondie
Mme	BARBIER Marie-Jeanne	Electrochimie
MM.	BARBIER Jean-Claude	Physique expérimentale
	BARBIER Reynold	Géologie appliquée
	BARJON Robert	Physique nucléaire
	BARNOUD Fernand	Biosynthèse de la cellulose
	BARRA Jean-René	Statistiques
	BARRIE Joseph	Clinique chirurgicale
	BEAUDOING André	Pédiatrie
	BEDIOT Jean	Radioélectricité
	BERNARD Alain	Mathématiques Pures
Mme	BERTRANDIAS Françoise	Mathématiques Pures
MM.	BESSON Jean	Electrochimie
	BEZES Henri	Chirurgie générale
	BLAMBERT Maurice	Mathématiques Pures
	BOLLIET Louis	Informatique (IUT B)
	BONNET Georges	Electrotechnique
	BONNET Jean-Louis	Clinique ophtalmologique
	BONNETAIN Lucien	Chimie minérale
	BONNET-GAMARD Joseph	Pathologie médicale
	BONNIER Etienne	Electrochimie Electrométallurgie
	BOUCHERLE André	Chimie et Toxicologie
	BOUCHEZ Robert	Physique nucléaire
	BOUSSARD Jean-Claude	Mathématiques Appliquées
	BRAVARD Yves	Géographie
	BRISSONNEAU Pierre	Physique du Solide
	BUYLE-BODIN Maurice	Electronique
	CABANAC Jean	Pathologie chirurgicale
	CAMMEL Guy	Clinique rhumatologique et hydrologie
	CALAS François	Anatomie
	CARRAZ Gilbert	Biologie animale et pharmacodynamie
	CAU Gabriel	Médecine légale et Toxicologie
	CAUQUIS Georges	Chimie organique
	CHABAUTY Claude	Mathématiques Pures
	CHARACHON Robert	Oto-Rhino-Laryngologie
	CHATEAU Robert	Thérapeutique
	CHENE Marcel	Chimie papetière
	CHIBON Pierre	Biologie animale
	COEUR André	Pharmacie chimique
	COMTAMIN Robert	Clinique gynécologique
	COUDERC Pierre	Anatomie Pathologique
	COUMES André	Radioélectricité
	CRAYA Antoine	Mécanique
Mme	DEBELMAS Anne-Marie	Métallurgie médicale
MM.	DEBELMAS Jacques	Géologie générale
	DEGRANGE Charles	Zoologie
	DEPORTES Charles	Chimie minérale
	DESRE Pierre	Métallurgie
	DESSAUX Georges	Physiologie animale

MM.	DODU Jacques	Mécanique appliquée
	DOLIQUE Jean-Michel	Physique des plasmas
	DREYFUS Bernard	Thermodynamique
	DUCROS Pierre	Cristallographie
	DUGOIS Pierre	Clinique de Dermatologie et Syphiligraphie
	FAU René	Clinique neuro-psychiatrique
	FELICI Noël	Electrostatique
	GAGNAIRE Didier	Chimie physique
	GALLISSOT François	Mathématiques Pures
	GALVANI Octave	Mathématiques Pures
	GASTINEL Noël	Analyse numérique
	GAVEND Michel	Pharmacologie
	GEINDRE Michel	Electroradiologie
	GERBER Robert	Mathématiques Pures
	GERMAIN Jean-Pierre	Mécanique
	GIRAUD Pierre	Géologie
	KAHANE André	Physique générale
	KLEIN Joseph	Mathématiques Pures
	KOSZUL Jean-Louis	Mathématiques Pures
	KRAVTCHENKO Julien	Mécanique
	KUNTZMANN Jean	Mathématiques Appliquées
	LACAZE Albert	Thermodynamique
	LACHARME Jean	Biologie végétale
	LAJZEROWICZ Joseph	Physique
	LATREILLE René	Chirurgie générale
	LATURAZE Jean	Biochimie pharmaceutique
	LAURENT Pierre	Mathématiques Appliquées
	LEDRU Jean	Clinique médicale B
	LLIBOUTRY Louis	Géophysique
	LONGEQUEUE Jean-Pierre	Physique nucléaire
	LOUP Jean	Géographie
Mle	LUTZ Elisabeth	Mathématiques Pures
	MALGRANGE Bernard	Mathématiques Pures
	MALINAS Yves	Clinique obstétricale
	MARTIN-NOEL Pierre	Sémiologie médicale
	MAZARE Yves	Clinique médicale A
	MICHEL Robert	Minéralogie et Pétrographie
	MOURIQUAND Claude	Histologie
	MOUSSA André	Chimie nucléaire
	NEEL Louis	Physique du Solide
	OZENDA Paul	Botanique
	PAUTHENET René	Electrotechnique
	PAYAN Jean-Jacques	Mathématiques Pures
	PEBAY-PEYROULA Jean-Claude	Physique
	PERRET René	Servomécanismes
	RASSAT André	Chimie systématique
	RENARD Michel	Thermodynamique
	REULOS René	Physique Industrielle
	RINALDI Renaud	Physique
	ROGET Jean	Clinique de pédiatrie et de puériculture
	DE ROUGEMONT Jacques	Neurologie
	SANTON Lucien	Mécanique
	SEIGNEURIN Raymond	Microbiologie et Hygiène
	SENGEL Philippe	Zoologie
	SILBERT Robert	Mécanique des fluides
	SOUTIF Michel	Physique générale
	TANCHE Maurice	Physiologie
	TRAYNARD Philippe	Chimie générale
	VAILLANT François	Zoologie
	VALENTIN Jacques	Physique Nucléaire
	VAUQUOIS Bernard	Calcul électronique
Mme	VERAIN Alice	Pharmacie galénique
M.	VERAIN André	Physique
MM.	VEYRET Paul	Géographie
	VIGNAIS Pierre	Biochimie médicale
	YOCCOZ Jean	Physique nucléaire théorique

PROFESSEURS ASSOCIES

MM. CHEEKE John	Thermodynamique
GILLESPIE John	I.S.N.
ROCKAFELLAR Ralph	Mathématiques appliquées
WOHLFARTH Erich	Physique du solide

PROFESSEURS SANS CHAIRE

MM. BELORIZKY Elie	Physique
BENZAKEN Claude	Mathématiques appliquées
BERTRANDIAS Jean-Paul	Mathématiques appliquées
BIAREZ Jean-Pierre	Mécanique
Mme BONNIER Jane	Chimie générale
MM. CARLIER Georges	Biologie végétale
COHEN Joseph	Electrotechnique
DEPASSEL Roger	Mécanique des Fluides
DURAND Francis	Métallurgie
GAUTHIER Yves	Sciences biologiques
GAUTRON René	Chimie
GIDON Paul	Géologie et Minéralogie
GLENAT René	Chimie organique
HACQUES Gérard	Calcul numérique
IDELMAN Simon	Physiologie animale
JANIN Bernard	Géographie
JOLY Jean-René	Mathématiques pures
JULLIEN Pierre	Mathématiques appliquées
Mme KAHANE Josette	Physique
MM. MAYNARD Roger	Physique du solide
MULLER Jean-Michel	Thérapeutique
PERRIAUX Jean-Jacques	Géologie et minéralogie
PFISTER Jean-Claude	Physique du solide
PIERY Yvette	Physiologie animale
POULOUJADOFF Michel	Electrotechnique
REBLCQ Jacques	Biologie (CUS)
REVOL Michel	Urologie
REYMOND Jean-Charles	Chirurgie générale
ROBERT André	Chimie papetière
SARRAZIN Roger	Anatomie et chirurgie
SARROT-REYNAULD Jean	Géologie
SIBILLE Robert	Construction Mécanique
SIROT Louis	Chirurgie générale
Mme SOUTIF Jeanne	Physique générale
MM. VIALON Pierre	Géologie
VAN CUTSEM Bernard	Mathématiques appliquées
ZADWORNY François	Electronique

MAITRES DE CONFERENCES ET MAITRES DE CONFERENCES AGREGES

Mle AGNIUS-DELORD Claudine	Physique pharmaceutique
ALARY Josette	Chimie analytique
MM. AMBLARD Pierre	Dermatologie
AMBROISE-THOMAS Pierre	Parasitologie
ARMAND Yves	Chimie

PROFESSEURS ASSOCIÉS

MM. CHEEKE John	Thermodynamique
GILLESPIE John	I.S.N.
ROCKAFELLAR Ralph	Mathématiques appliquées
WOHLFARTH Erich	Physique du solide

PROFESSEURS SANS CHAIRE

MM. BELORIZKY Elie	Physique
BENZAKEN Claude	Mathématiques appliquées
BERTRANDIAS Jean-Paul	Mathématiques appliquées
BIAREZ Jean-Pierre	Mécanique
Mme BONNIER Jane	Chimie générale
MM. CARLIER Georges	Biologie végétale
COHEN Joseph	Electrotechnique
DEPASSEL Roger	Mécanique des fluides
DURAND Francis	Métallurgie
GAUTHIER Yves	Sciences biologiques
GAUTRON René	Chimie
GIDON Paul	Géologie et Minéralogie
GLENAT René	Chimie organique
HACQUES Gérard	Calcul numérique
IDELMAN Simon	Physiologie animale
JANIN Bernard	Géographie
JOLY Jean-René	Mathématiques pures
JULLIEN Pierre	Mathématiques appliquées
Mme KAHANE Josette	Physique
MM. MAYNARD Roger	Physique du solide
MULLER Jean-Michel	Thermodynamique
PERRIAUX Jean-Jacques	Géologie et minéralogie
PFISTER Jean-Claude	Physique du solide
PIERRY Yvette	Physiologie animale
POULOUJADOFF Michel	Electrotechnique
REBLOO Jacques	Biologie (CUS)
REVOL Michel	Urologie
REYMOND Jean-Charles	Chirurgie générale
ROBERT André	Chimie papetière
SARRAZIN Roger	Anatomie et chirurgie
SARROT-REYNAULD Jean	Géologie
SIBILLE Robert	Construction Mécanique
SIROT Louis	Chirurgie générale
Mme SOUTIF Jeanne	Physique générale
MM. VIALON Pierre	Géologie
VAN CUTSEM Bertrand	Mathématiques appliquées
ZADWORNY François	Electronique

MAITRES DE CONFERENCES ET MAITRES DE CONFERENCES AGREGES

Mlle ADNIUS-DELORD Claudine	Physique pharmaceutique
ALARY Josette	Chimie analytique
MM. AMBLARD Pierre	Dermatologie
AMBROISE-THOMAS Pierre	Parasitologie
ARNAUD Yves	Chimie

MM. BEGUIN Claude	Chimie organique
BILLET Jean	Géographie
BLIMAN Samuel	Electronique (EIE)
BLOCH Daniel	Electrotechnique
Mme BOUCHE Liane	Mathématiques (CUS)
MM. BOUCHET Yves	Anatomie
BOUVARD Maurice	Mécanique des Fluides
BRODEAU François	Mathématiques (IUT B)
BRUGEL Lucien	Energétique
BUISSON Roger	Physique
BUTEL Jean	Orthopédie
CHAMBAZ Edmond	Biochimie médicale
CHAMPETIER Jean	Anatomie et organogénèse
CHERADAME Hervé	Chimie papetière
CHIAVERINA Jean	Biologie appliquée (EFP)
COHEN-ADDAD Jean-Pierre	Spectrométrie physique
COLOMB Maurice	Biochimie médicale
CONTE René	Physique
COULOMB Max	Radiologie
CROUZET Guy	Radiologie
CYROT Michel	Physique du solide
DELOBEL Claude	M.I.A.G.
DUSSAUD René	Mathématiques (CUS)
Mme ETERRADOSSI Jacqueline	Physiologie
MM. FAURE Jacques	Médecine légale
FONTAINE Jean-Marc	Mathématiques Pures
GENSAC Pierre	Botanique
GIDON Maurice	Géologie
GRIFFITHS Michaël	Mathématiques Appliquées
GROULADE Joseph	Biochimie médicale
GUITTON Jacques	Chimie
HOLLARD Daniel	Hématologie
HUGONOT Robert	Hygiène et Médecine préventive
IVANES Marcel	Electricité
JALBERT Pierre	Histologie
JOUBERT Jean-Claude	Physique du Solide
KRAKOWIAK Sacha	Mathématiques appliquées
KUHN Gérard	Physique
LACOUME Jean-Louis	Physique
Mme LAJZEROWICZ Jeanninе	Physique
MM. LANCIA Roland	Physique atomique
LE JUNTER Noël	Electronique
LEROY Philippe	Mathématiques
LOISEAUX Jean-Marie	Physique Nucléaire
LUU DUC Cuong	Chimie Organique
MACHE Régis	Physiologie végétale
MAGNIN Robert	Hygiène et Médecine préventive
MARECHAL Jean	Mécanique
MARTIN-BOUYER Michel	Chimie (CUS)
MICHOULIER Jean	Physique (I.U.T. "A")
MICOUD Max	Maladies Infectieuses
MOREAU René	Hydraulique (INP)
NEGRE Robert	Mécanique
PARAMELLE Bernard	Pneumologie
PECCOUD François	Analyse (IUT B)
PEFFEN René	Métallurgie
PELMONT Jean	Physiologie animale
PERRET Jean	Neurologie
PERRIN Louis	Pathologie expérimentale
PHELIP Xavier	Rhumatologie

MM. RACHAIL Michel	Médecine interne
RACINET Claude	Gynécologie et obstétrique
RAYNAUD Hervé	M.I.A.G.
RENAUD Maurice	Chimie
RICHARD Lucien	Botanique
Mme RINAUDO Marguerite	Chimie macromoléculaire
MM. ROMIER Guy	Mathématiques (IUT B)
SHOM Jean Claude	Chimie Générale
STIEGLITZ Paul	Anesthésiologie
STOEBNER Pierre	Anatomie pathologique
VEILLON Gérard	Mathématiques Appliquées (INP)
VOOG Robert	Médecine interne
VROUSSOS Constantin	Radiologie

MAITRES DE CONFERENCES ASSOCIES

MM. CRABLEE Pierre	C.E.R.M.O.
CURRIE Jan	Mathématiques appliquées
YACOUD Mahmoud	Médecine légale

CHARGES DE FONCTIONS DE MAITRES DE CONFERENCES

Mme BERIEL Hélène	Physiologie
Mme RENAUDET Jacqueline	Microbiologie

Fait le 1.10.73

TABLE DES MATIERES

Sommaire iv

CHAPITRE I - Introduction 1

CHAPITRE II - Eléments de théorie 3

II.1 - Introduction 3

II.2 - Approximation de Born 4

2-1 - Théorie 4

2-2 - Discussion 6

3 - Modèle de Garcia 9

3-1 - Approximation et validité 9

3-2 - Théorie de Garcia 11

4 - Problèmes relatifs aux ions lourds 17

4-1 - Intérêt des ions lourds 17

4-2 - Problèmes théoriques posés par l'utilisation d'ions lourds 18

5 - Conclusion 23

CHAPITRE III - Montage expérimental 26

III.1 - Introduction 26

III.2 - Montage de la ligne 27

III.3 - Préparation des cibles 30

III.4 - Le détecteur 32

CHAPITRE IV - Programmes de calcul 36

IV.1 - Introduction 36

IV.2 - Programme d'analyse qualitative 37

IV.3 - Programme d'analyse quantitative 42

CHAPITRE V - Exemples de résultats obtenus 46

V.1 - Introduction 46

V.2 - Etude d'une eau minérale 46

V.3 - Etude d'un alliage 49

CHAPITRE VI - Perspectives d'avenir 53

CONCLUSION 58

REMERCIEMENTS 60

TABLE DES HORS-TEXTES 61

BIBLIOGRAPHIE 62

APPENDICE - LISTE DES PROGRAMMES -

SOMMAIRE

Le démarrage d'un nouveau programme de recherches implique un important travail et mise-au-point instrumentale, de développement de programmes de calcul, et d'information sur le plan théorique. J'ai participé à ce travail dans le cas du projet d'analyse de traces d'éléments par excitation de rayons-X caractéristiques au moyen de particules chargées produites par un accélérateur. Le but recherché était non seulement de déterminer les conditions les plus favorables à des analyses précises et sensibles, mais aussi de mettre au point un système parfaitement fonctionnel, destiné à être utilisé de façon rentable et avec une grande diversité d'applications.

CHAPITRE I

Introduction

Les recherches sur l'analyse de traces d'éléments par excitation de rayons-X au moyen d'un faisceau de particules chargées participent à l'effort actuel de la physique nucléaire pour développer des techniques utiles à des applications contemporaines. Au sommaire de ces applications, il faut souligner plus particulièrement celles relatives aux domaines de la médecine et de l'environnement, puisque là plus qu'ailleurs, sans doute, les phénomènes étudiés mettent en jeu de très faibles quantités d'éléments.

Dans cette optique, le Laboratoire de Physique Nucléaire de l'Université de Montréal a décidé l'achat en septembre 1972 d'un détecteur de rayons-X, destiné à fonctionner sur l'un des faisceaux de l'accélérateur Tandem Van de Graaff. Les récents progrès accomplis dans la technologie des détecteurs à état solide ont en effet permis le développement de la méthode d'analyse, qui par son haut degré de sensibilité (surtout avec des ions lourds) supplante déjà les techniques d'analyse traditionnelle Par ailleurs, la possibilité d'étudier simultanément un grand nombre d'éléments sur la quasi totalité de la classification périodique se révèle particulièrement intéressante.

Il va sans dire que, dès la réception du détecteur, un important

travail a du être entrepris, en vue notamment de développer une technique souple, rapide et efficace d'acquisition et de traitement des données. Ma contribution à cette tâche a consisté à dégager le plus possible l'expérimentateur de la partie fastidieuse du dépouillement des résultats, tout en lui permettant en cours de manipulation d'obtenir le maximum d'informations sur l'étude en cours et d'optimiser les conditions expérimentales en vue d'une recherche spécifique d'éléments. Le dernier point surtout m'a amené à me familiariser avec les résultats obtenus dans d'autres laboratoires, et les éléments des théories existantes, en particulier celle développée par Mœrzbacher et Lewis dans le cadre de l'approximation de Born et le modèle de Garcia fondé sur l'approximation soudaine. Pour le reste j'ai participé à la construction d'une ligne pour les rayons-X à la sortie de l'accélérateur Tandem du laboratoire, l'accent étant surtout placé sur l'aspect fonctionnel du montage. Enfin, j'ai écrit un ensemble de programmes d'ordinateur groupés en un système que j'ai voulu cohérent et d'utilisation particulièrement souple, aussi bien pour un traitement en ligne que pour une étude ultérieure. A titre d'exemple, je présente à la fin de ce mémoire les résultats encourageants de deux séries d'expériences portant sur des analyses d'eau minérale et des analyses d'alliages fer-chrome. Je conclus enfin en proposant quelques améliorations pour l'avenir, notamment en ce qui concerne la détermination des sections efficaces et la réalisation de cibles d'étalonnage.

CHAPITRE II

ELEMENTS DE THEORIE

1. Introduction

Le phénomène d'excitation des rayons-X caractéristiques d'un élément par bombardement de photons ou de particules chargées est connu depuis fort longtemps. Toutefois, c'est uniquement avec l'avénement des techniques expérimentales récentes, que des éléments de théorie se sont développés, avec l'étude de Merzbacher (1) tout d'abord, fondée sur l'approximation de Born, en 1958, puis avec le modèle de Garcia (2 et 3), en 1970, utilisant l'approximation soudaine. Une autre méthode, dite "méthode de paramètre d'impact" (4) ne sera pas développée ici car son domaine de validité correspond à des énergies pour les ions incidents de l'ordre des énergies de liaison des électrons de couch profondes des atomes de la cible, soit quelques keV, ce qui ne se présente pas dans nos expériences. Les deux premiers paragraphes décrivent successivement ces deux théories. La partie suivante est une discussion du modèle de Garcia dans le cas de collisions avec des ions lourds.

2. Approximation de Born

2.1 - Théorie:

La production d'une vacance dans les couches électroniques profondes d'un atome (couches K, L ou M) est due à l'interaction de Coulomb entre l'électron lié et l'ion incident. Conformément à l'approximation de Born le projectile est décrit par une onde plane avant et après la collision. On admet que l'état excité de l'atome cible est celui dans lequel l'électron lié a été éjecté vers le continuum. Merzbacher et Lewis (1) signalent en effet que l'excitation vers des orbites inoccupées est négligeable. Pour une couche K comprenant deux électrons on trouve une section efficace différentielle:

$$d\sigma_{nn'}(q) = 16\pi z^2 \left(\frac{e^2}{\hbar v}\right)^2 \frac{dq}{q^3} \left| \int e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \psi^*_{n'}(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}) d^3r \right|^2$$

avec $\hbar\vec{q} = \vec{p} - \vec{p}'$ impulsion transférée au cours de la collision

z charge de l'ion incident

v vitesse de l'ion incident

$\vec{r}$ coordonnées de l'électron relativement au noyau

ψ_n et $\psi_{n'}$ fonctions d'onde initiale et finale de l'électron .

Cette formule représente la probabilité, pour un transfert d'impulsion dq, de retrouver l'électron dans l'état final n' c'est-à-dire avec une énergie cinétique bien définie. La section efficace totale de

création de vacance s'obtient alors en intégrant sur toutes les valeurs du transfert d'impulsion $\vec{q}$; on trouve alors:

$$\sigma_K \simeq \frac{2^{20} a_0^2}{45} \pi z^2 \frac{\eta_K^4}{Z^4}$$

avec $$\eta_K = \frac{m E}{M Z^2 \text{ Rydberg}}$$

E énergie de l'ion incident

a_0 rayon de Bohr

Z charge du noyau de l'atome cible

m masse de l'électron

M masse de l'ion incident.

On retiendra seulement de cette formule qu'elle exprime une dépendance en fonction des conditions expérimentales du type

$$\sigma_K = f\left(z^2 \frac{(E/M)^4}{Z^{12}} \right)$$

Une formule analogue peut être obtenue pour la création de vacances dans la couche L.

On peut déjà prévoir ici l'intérêt d'utiliser des ions lourds. La possibilité de travailler avec des états de charge élevés permet non seulement de disposer d'énergies d'accélération importantes, mais aussi de faire croitre la section efficace proportionnellement à z^2.

La rapide décroissance en fonction de Z a été bien mise en évidence par Livingston, Genevese et Konopinski, en utilisant un faisceau de protons de 1.76 MeV sur des cibles allant de Z=12 jusqu'à 82. Le résultat est représenté sur la figure 1 . L'allure de la courbe est due à l'effet combiné de la décroissance en Z^{12} et de l'atténuation des rayons-X de faible énergie dans l'air et les fenêtres entre la cible et le détecteur.

2.2 - Discussion :

En fait le résultat présenté ici n'est qu'une approximation. Si l'on considère une couche s, il faut tenir compte, d'une part de l'effet d'écran qui diminue la charge du noyau de la cible vue par l'électron de Z à Z_s, et d'autre part de la diminution de l'énergie de liaison de l'électron due aux autres électrons. Ce dernier effet peut être représenté par un nouveau paramètre

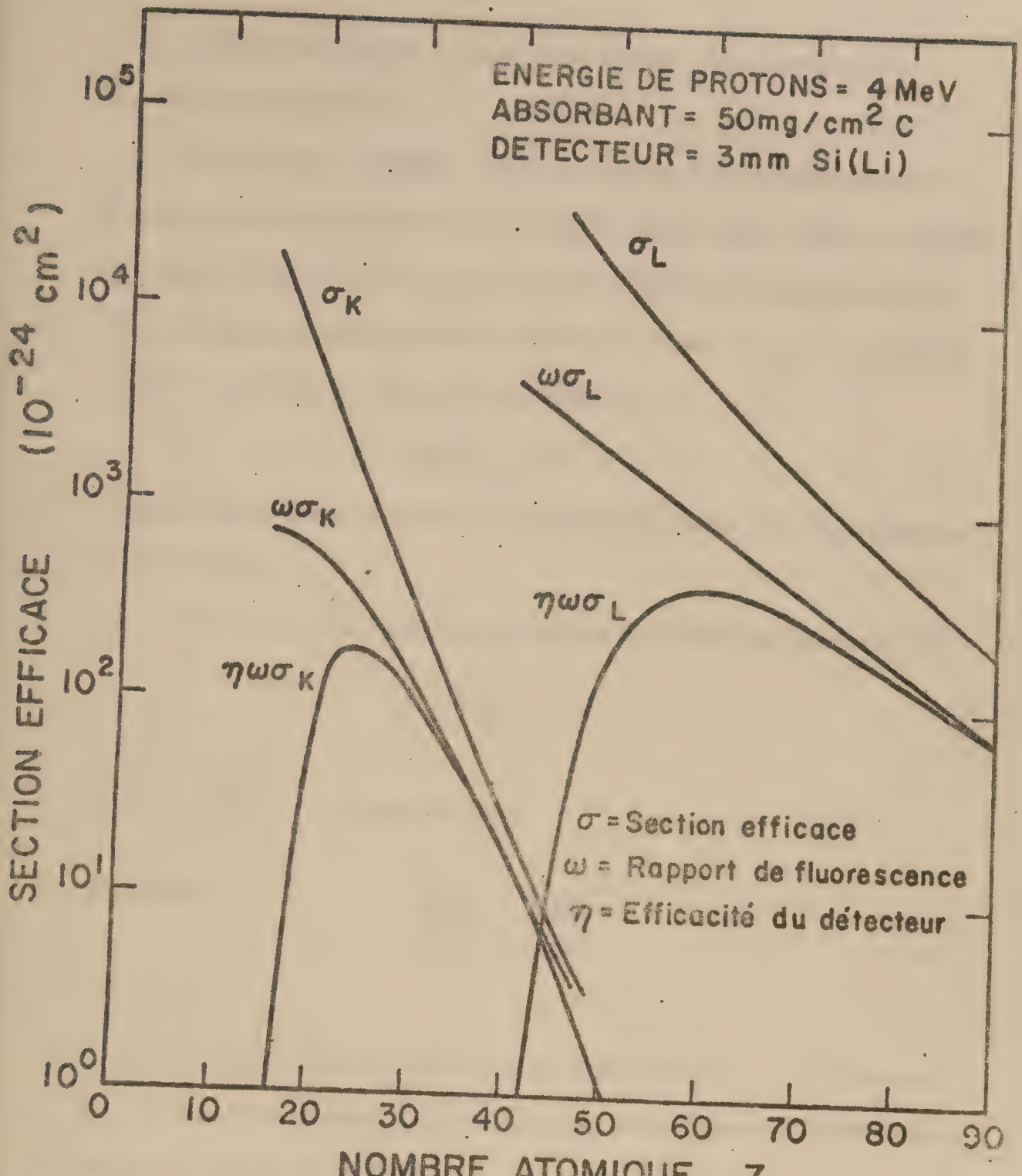
$$\theta_s = \frac{n_s^2 u_s}{Z_s^2}$$

avec n_s = nombre quantique principal de la couche s ;

u_s = énergie de liaison de l'électron sur la couche s.

Dans ces conditions, la section efficace totale de création d'une vacance dans la couche s devient

$$\sigma_s = \frac{8\pi z^2 a_0^2}{Z_s^4 \eta_s} f_s(\theta_s, \eta_s)$$



SENSIBILITE A LA DETECTION DE TRACES D'ELEMENTS

FIG. 1

Les expression de f_K et f_L sont données dans l'article de Merzbacher et Lewis (1).

Il est aisé de vérifier que les expériences réalisées à l'aide d'accélérateurs satisfont toujours très largement le critère de validité de l'approximation de Born; ce dernier traduit le fait qu'il faut considérer uniquement des collisions d'énergie grande devant l'énergie de liaison de l'électron. En effet la condition

$$\frac{z\,Z\,e^2}{\hbar\,v} \ll 1$$

impose à la longueur d'onde de l'ion incident d'être très inférieure au rayon de Bohr.

En fonction de l'énergie de liaison de l'électron sur sa couche

$$u_K = \frac{Z\,e^2}{a / Z}$$

avec $a = \dfrac{\hbar^2}{m\,e^2}$ rayon de Bohr

on trouve:

$$\frac{E}{M} \Big/ \frac{u}{m} > \frac{z\,\hbar v}{2Z\,e^2}$$

E et M étant l'énergie et la masse de l'ion incident, v sa vitesse.

Pour des protons de 5 MeV et des éléments de la cible voisins du fer on doit avoir environ:

$$E / u_K > 20$$

ce qui est très largement réalisé (u_K est de l'ordre de 7 keV).

Toutefois, ainsi que le montrent les figures 2 et 3, l'accord avec l'expérience n'est pas toujours parfait, et l'application d'une telle théorie risquerait d'introduire des erreurs jusqu'à un ordre de grandeur dans la détermination des concentrations de certains éléments d'un échantillon.

D'autre part certaines considérations théoriques laissent prévoir qu'une meilleure précision doit pouvoir être obtenue assez facilement. Supposons pour simplifier qu'une particule 1 de masse m interagisse avec une particule 2 de même masse liée à un centre de masse infinie par un potentiel coulombien. L'amplitude de probabilité de transition d'un état n vers un état n' sera

$$f_{nn'} = -\frac{1}{4\pi}\iint U(r_{12})\, e^{i(\vec{k}_n-\vec{k}_{n'})\cdot\vec{r}_1}\, \psi^*_{n'}(\vec{r}_2)\, \psi_n(\vec{r}_2)\, d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

avec $\vec{k}_n$ et $\vec{k}_{n'}$ vecteurs d'onde initiaux et finaux de la particule 1;

ψ_n et $\psi_{n'}$ fonctions d'ondes initiale et finale de la particule 2;

$\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_{12}$ vecteurs position des particules 1 et 2 par rapport au centre, et entre elles.

En posant $\vec{r} = \vec{r}_{12}$ on peut transformer cette expression en:

$$f_{nn'} = -\frac{1}{4\pi}\int U(r)\, e^{i(\vec{k}_n-\vec{k}_{n'})\cdot\vec{r}}\, d\vec{r} \int e^{i(\vec{k}_n-\vec{k}_{n'})\cdot\vec{r}_2}\, \psi^*_{n'}(\vec{r}_2)\psi_n(\vec{r}_2)d\vec{r}_2$$

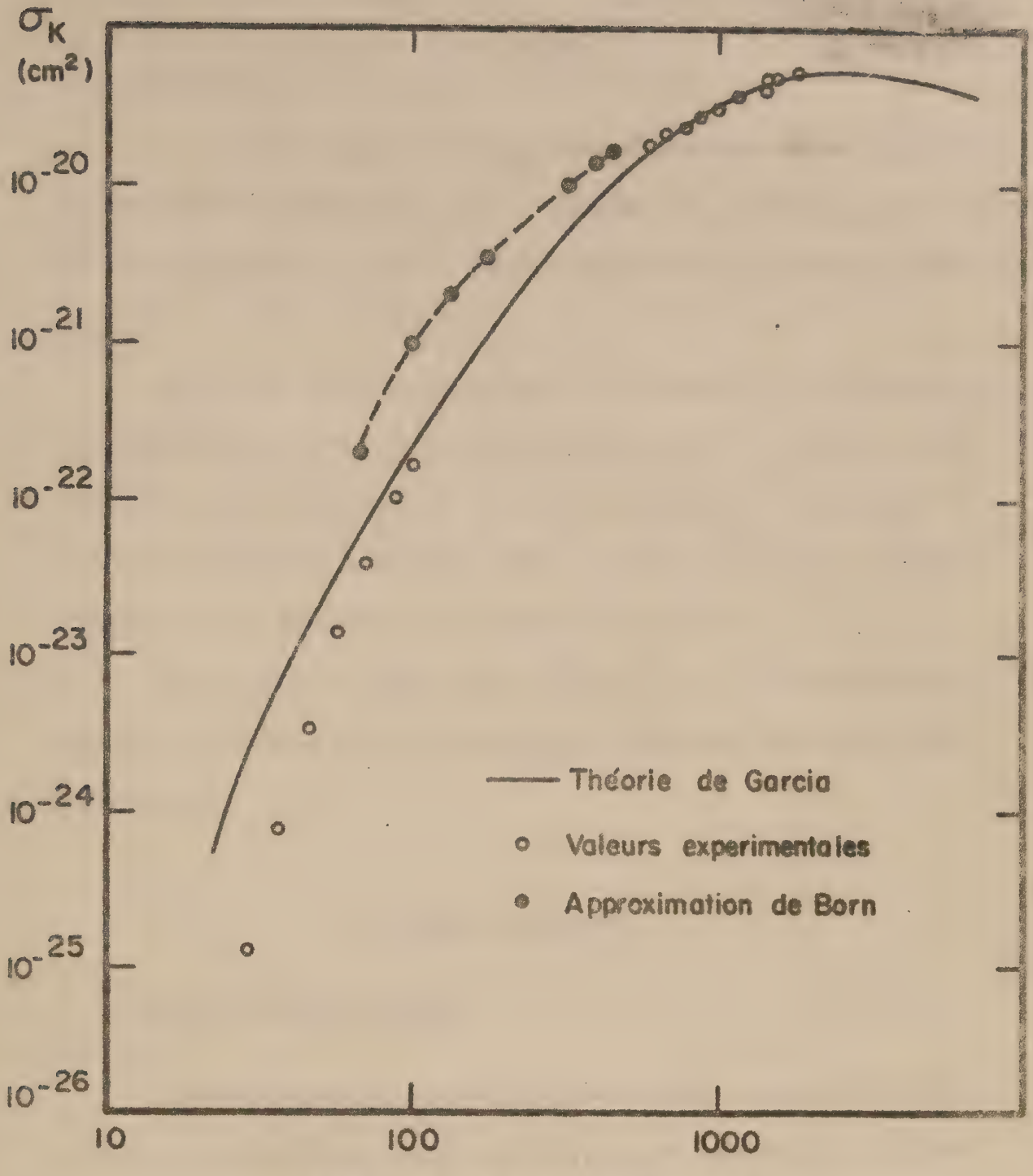


FIG.2 Variation de la section efficace de production des raies K du magnésium avec l'énergie des protons

Le second facteur ne fait intervenir que la particule liée. Nous l'appellerons "facteur de forme".

Le premier facteur est proportionnel à l'amplitude de probabilité de transition d'un état n à un état n', calculé à la première approximation de Born, pour deux particules libres soumises à un potentiel d'interaction U(r).

Or on sait résoudre exactement le problème de l'interaction de deux particules libres. Il doit donc être possible, tout en conservant intact le facteur de forme, de remplacer l'amplitude de Born dans le premier terme par l'amplitude exacte et d'obtenir ainsi une meilleure évaluation de la probabilité de création de vacances.

Ce calcul a été effectué par Garcia (2, 3 et 5) et j'ai largement utilisé les résultats qu'il a obtenus pour développer les programmes d'analyse.

3. Modèle de Garcia

3.1 - Approximation et validité:

Le développement du paragraphe précédent peut être aisément étendu au cas d'un électron lié à un noyau et bombardé par un ion de masse quelconque. Si m_1 et m_2 sont les masses respectives de l'ion incident et de l'électron, l'amplitude de la transition s'écrit (6):

$$f_{nn'} \quad \frac{m_1 + m_2}{m_2} F\left\{ \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{k}_n, \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{k}_n + \vec{q} \right\} F_{nn'}(\vec{q})$$

où $\vec{q}$ est le transfert d'impulsion et $F_{nn'}(\vec{q})$ le facteur de forme:

$$F_{nn'}(\vec{q}) = \int \psi^*_{n'}(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} d\vec{r}$$

Il apparait clairement que $f_{nn'}$ dépend non seulement du transfert d'impulsion $\vec{q}$ mais aussi de l'impulsion relative initiale $\vec{k}_n$. Il est donc indispensable que cette dernière soit parfaitement définie au moment du choc, c'est-à-dire que l'interaction soit limitée à un temps très court devant la période de révolution de l'électron sur son orbite. Cette méthode qui consiste à considérer un changement brusque dans la nature de l'hamiltonien, porte le nom d'approximation soudaine.
La durée de collision est donnée approximativement par $\frac{a}{v}$ où v est la vitesse de la particule incidente et "a" le rayon de la couche K par exemple
La période approchée de l'électron sur sa couche est $\hbar/u_K$ où u_K est l'énergie de liaison:

$$u_K = \frac{Ze^2}{a}$$

Le critère de validité de l'approximation soudaine s'écrit dans ces conditions:

$$\frac{a\,u_K}{\hbar v} \ll 1 \qquad \text{ou encore} \quad \frac{Z\,e^2}{\hbar v} \ll 1$$

On trouve exactement le même résultat que pour l'approximation de Born pour un faisceau de protons. Ces deux méthodes ont donc le même domaine d'utilisation: celui des énergies élevées devant les énergies de liaison des électrons dans les couches profondes.

3.2 - Théorie de Garcia:

Le point de vue qui vient d'être developpé permet de considérer l'interaction comme un échange d'énergie direct entre l'électron et l'ion incident, le rôle du noyau cible étant uniquement de donner à l'électron une distribution de quantité de mouvement. Or le calcul de section efficace différentielle pour une interaction de Coulomb étant identique en mécanique classique et en mécanique quantique, il suffit d'appliquer le résultat de la mécanique classique, sauf évidemment en ce qui concerne la répartition de la quantité de mouvement de l'électron. Dans une première étape il faut sommer sur tous les échanges d'impulsion compatibles avec un échange d'énergie ΔE. On intègre ensuite sur tous les échanges d'énergie possibles, le résultat étant pondéré par la distribution de quantités de mouvement de l'électron sur son état lié. Affectons de l'indice 1 tout ce qui concerne l'ion incident et de l'indice 2 tout de qui se rapporte à l'électron dont l'énergie de liaison sur la couche s est u_s.

Pour une vitesse v_2 de l'électron sur sa couche la section efficace d'interaction s'écrit:

$$\sigma_i(v_1,v_2) = \int_u^{E_1} \frac{d\sigma}{d\Delta E}\, d\Delta E$$

où $\frac{d\sigma}{d\Delta E}$ est la section efficace dans le système du laboratoire pour un échange d'énergie ΔE entre la particule incidente de vitesse $\vec{v}_1$, et l'électron dont le vecteur vitesse $\vec{v}_2$ est supposé avoir une distribution isotrope. Le calcul de l'interaction de Coulomb dans une telle configuration a été effectué par Gerjuoy (7) et le résultat de l'intégrale pour un domaine d'énergie ΔE est donné par Garcia (2):

$$\int^{\Delta E} \frac{d\sigma}{d\Delta E}\, d\Delta E = \frac{\pi}{3} \frac{(Z_1 e^2)^2}{v_1^2\, v_2} \left[-\frac{2v_2^3}{(\Delta E)^2} - \frac{(6v_2 / m_e)}{\Delta E} \right] \qquad 0 < \Delta E < b'$$

$$\int^{\Delta E} = \frac{\pi (Z_1 e^2)^2}{3\, v_1^2\, v_2} \left[3\, \frac{v_1/m_1 - v_2/m_e}{\Delta E} + \frac{(v_2'^3 - v_2^3) - (v_1^3 + v_1'^3)}{(\Delta E)^2} \right] \qquad b' < \Delta E < a'$$

$$\int^{\Delta E} = 0 \qquad \Delta E > a' \text{ et } m_e v_2 < (m_1 - m_e)\frac{v_1}{2}$$

$$\int^{\Delta E} = \frac{\pi (Z_1 e^2)^2}{3\, v_1^2 v_2} \left[-\frac{2v_1'^3}{(\Delta E)^2} \right] \qquad \Delta E > a' \text{ et } 2m_e v_2 > (m_1 - m_e) v_1$$

où $$a' = \frac{4m_1 m_e}{(m_1 + m_e)^2} \left(E_1 - E_2 + \frac{v_1 v_2}{2} (m_1 - m_e) \right)$$

est le transfert maximum d'énergie pour un électron libre au cours d'une collision.

$$b' = \frac{4m_1 m_e}{(m_1 + m_e)^2} \left(E_1 - E_2 - \frac{v_1 v_2}{2} (m_1 - m_e) \right)$$

$$v_1' = (v_1^2 - 2\Delta E/m_1)^{1/2}$$

$$v_2' = (v_2^2 + 2\Delta E/m_e)^{1/2}$$

L'expression finale de la section efficace est obtenue en sommant le résultat précédent sur toutes les valeurs possible s de la vitesse v_2 après avoir pondéré par un facteur de distribution de la vitesse de l'électron sur sa couche:

$$\sigma_I(v_1) = N_i \int_0^{\omega} \sigma_i(v_1, v_2) f(v_2) dv_2$$

N_i étant le nombre d'électrons équivalents sur le niveau s considéré.

Pour un atome hydrogénoïde la distribution des vitesses est donnée par:

$$f(v_2) = 32\pi^{-1} v_0^5 \left[v_2^2 / (v_2^2 + v_0^2)^4 \right]$$

avec

$$v_0 = \left(\frac{2u_s}{m} \right)^{1/2}$$

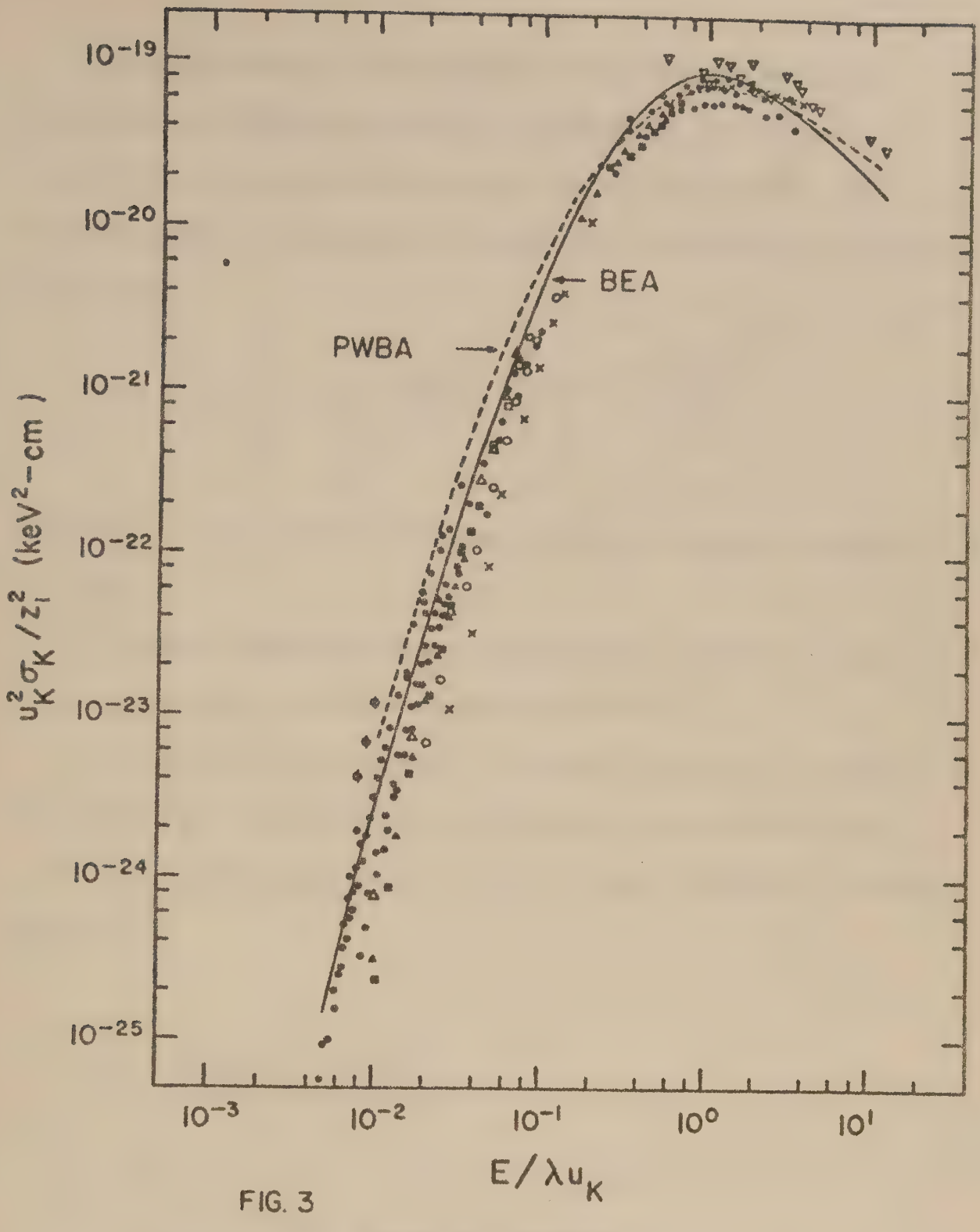


FIG. 3

Comparaison des résultats expérimentaux pour des protons avec les théories de l'approximation de Born (PWBA) et de l'approximation soudaine (BEA)

Des corrections ont été apportées à cette théorie pour tenir compte de la répulsion nucléaire sur l'ion incident. Ce phénomène a pour effet non seulement de diminuer l'énergie du projectile, mais aussi d'augmenter le paramètre d'impact. La correction a été calculée par Garcia:

$$\sigma_I(E_1) = \sigma_I(E_1')\left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\left\{1 - \frac{2ZE^2}{E_1\sigma(E_1')} \times \left[a - \left(a^2 - \frac{\sigma(E_1')}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\right]\right\}^{\frac{1}{2}}\right]^2$$

où $\sigma_I(E_1')$ est la section efficace précédente calculée à l'énergie $E_1 - \frac{Ze^2}{a}$.

Notons simplement que ces effets ne sont sensibles qu'à faible énergie et ne nous concernent pratiquement jamais.

La section efficace calculée à l'aide de la formule de distribution des vitesses de l'électron donnée précédemment, peut être exprimée comme une fonction universelle du rapport énergie incidente sur énergie de liaison:

$$\frac{u^2\,\sigma_I}{z^2} = f\left(\frac{E_I}{\lambda u}\right)$$

$\lambda = \frac{m}{m_e}$ $\quad$ m masse de l'ion incident

m_e masse de l'électron.

Cette relation universelle est tracée sur la figure 3 et montre un excellent accord avec les expériences effectuées avec des faisceaux de protons et de particules alphas sur n'importe quelle cible. Ceci ne doit pas surprendre si l'on se souvient que l'interaction de Coulomb est traitée ici exactement et non en terme de perturbation comme dans l'approximation de Born.

L'existence d'une telle relation peut s'expliquer qualitativement.

On peut s'attendre en effet à avoir un maximum de la section efficace lorsque l'énergie du projectile ramenée à la masse d'un électron devient égale à l'énergie de liaison de l'électron dans la cible. On peut d'autre part établir une certaine liaison avec les résultats obtenus dans le cas de l'approximation de Born. On note en effet que

$$\theta_K^2 \left[\frac{Z_K^4 \, \sigma_K}{z^2} \right] = \frac{u_K^2 \, \sigma_K}{z^2}$$

et que

$$\frac{\eta_K}{\theta_K} = \frac{m_e E}{M_1 u_K} = \frac{E}{\lambda u_K}$$

Mais ici la relation entre ces deux quantités dépend de θ_K ainsi que le montre la figure 4. Sur cette figure, on a tracé aussi le résultat prévu par le modèle de Garcia.

Dans le domaine d'énergie qui nous intéresse (quelques MeV), l'accord avec l'expérience de la théorie de Garcia est excellent.

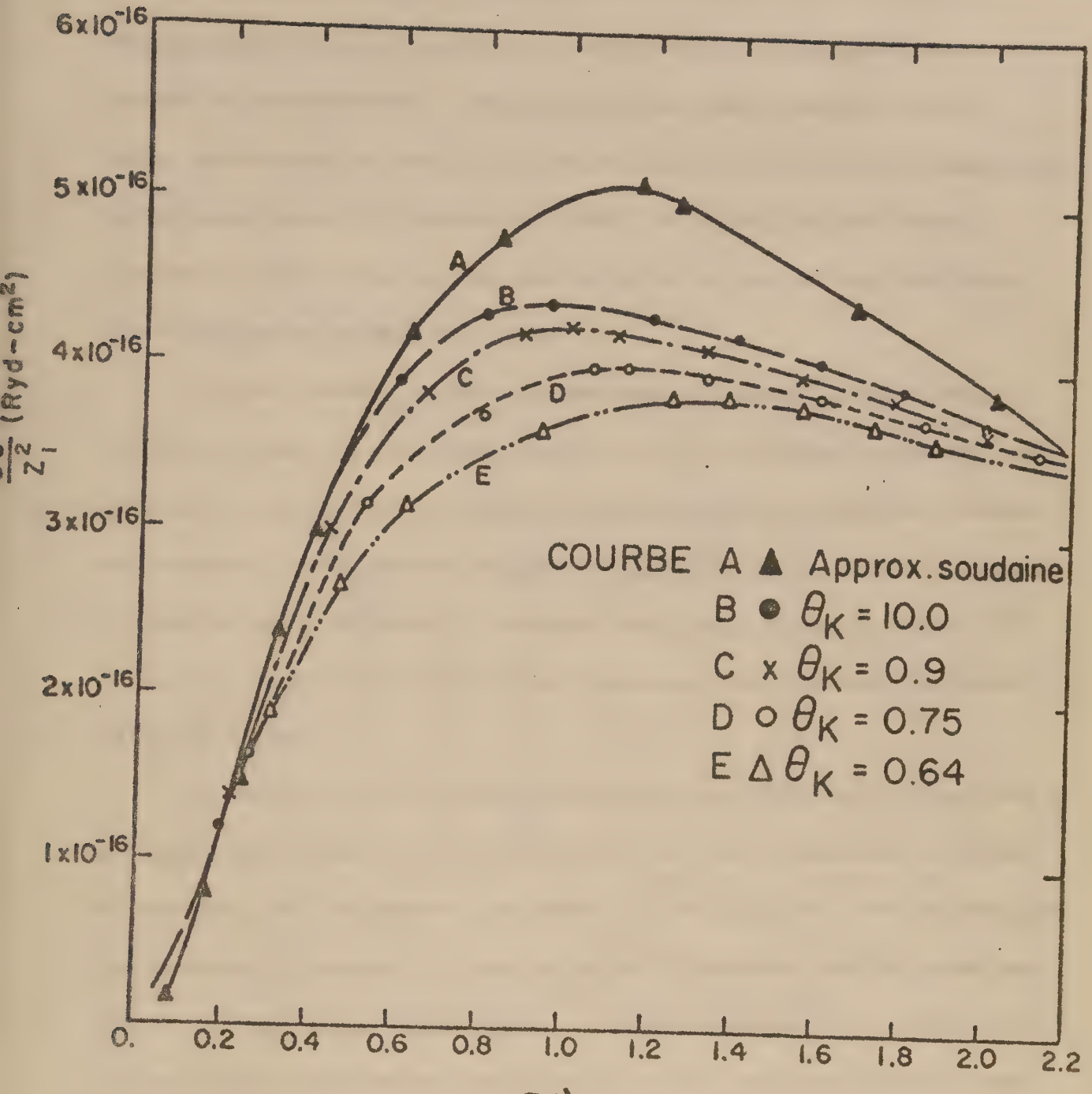
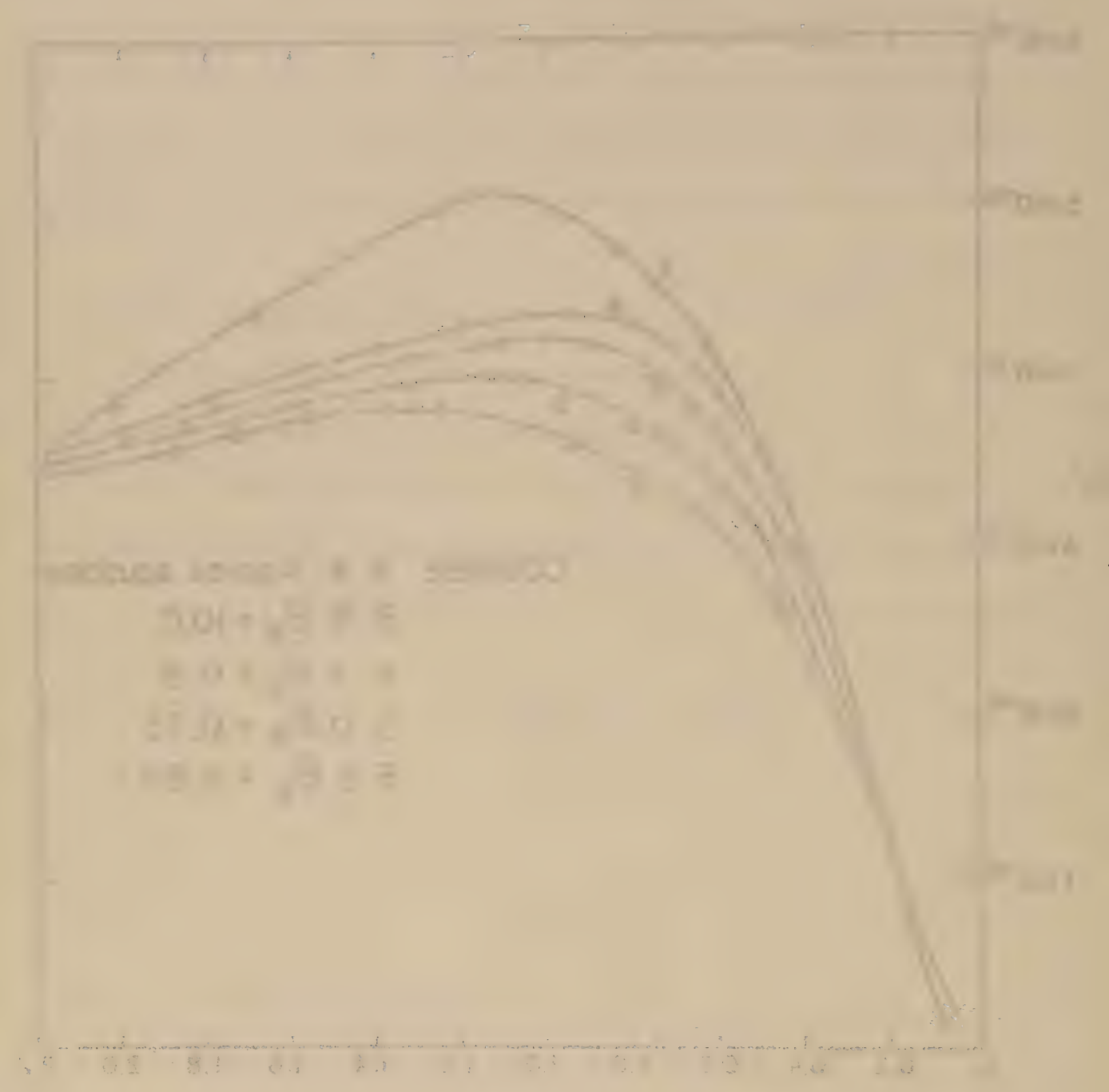


FIG. 4
COMPARAISON DES RESULTATS DE BORN ET DE GARCIA



Toutefois à faible énergie (inférieure à 100 keV) le modèle prévoit une valeur de la section efficace supérieure aux valeurs expérimentales. En effet dans ce cas le système ion incident-atome cible a tendance à évoluer adiabatiquement. L'électron voit une charge nucléaire plus forte, qui diminue le rayon de la couche sur laquelle il évolue et donc aussi la section efficace. Un traitement exact a été développé par Brandt, Lambert et Sellin mais je ne le décris par ici vu que cet effet est totalement négligeable au delà d'un MeV.

Il peut sembler surprenant que dans son modèle, Garcia néglige totalement l'effet de recul du noyau de la cible au moment du transfert de quantité de mouvement. Il s'agit là d'une approximation qui peut paraître discutable et Garcia prévoit d'ailleurs de généraliser sa théorie en tenant compte des effets de recul. Toutefois, ainsi que l'a montré Vriens [8], et que le prouvent les résultats expérimentaux, l'erreur ainsi introduite est assez faible.

Il ressort des expériences effectuées dans différents laboratoires que le modèle théorique de Garcia prévoit des sections efficaces de création de vacances très largement confirmées par les mesures, avec les énergies couramment disponibles à la sortie des accélérateurs, tout au moins pour des protons et des particules alphas. Il reste à étudier dans quelle mesure on peut étendre le domaine d'application de cette théorie à des faisceaux d'ions lourds.

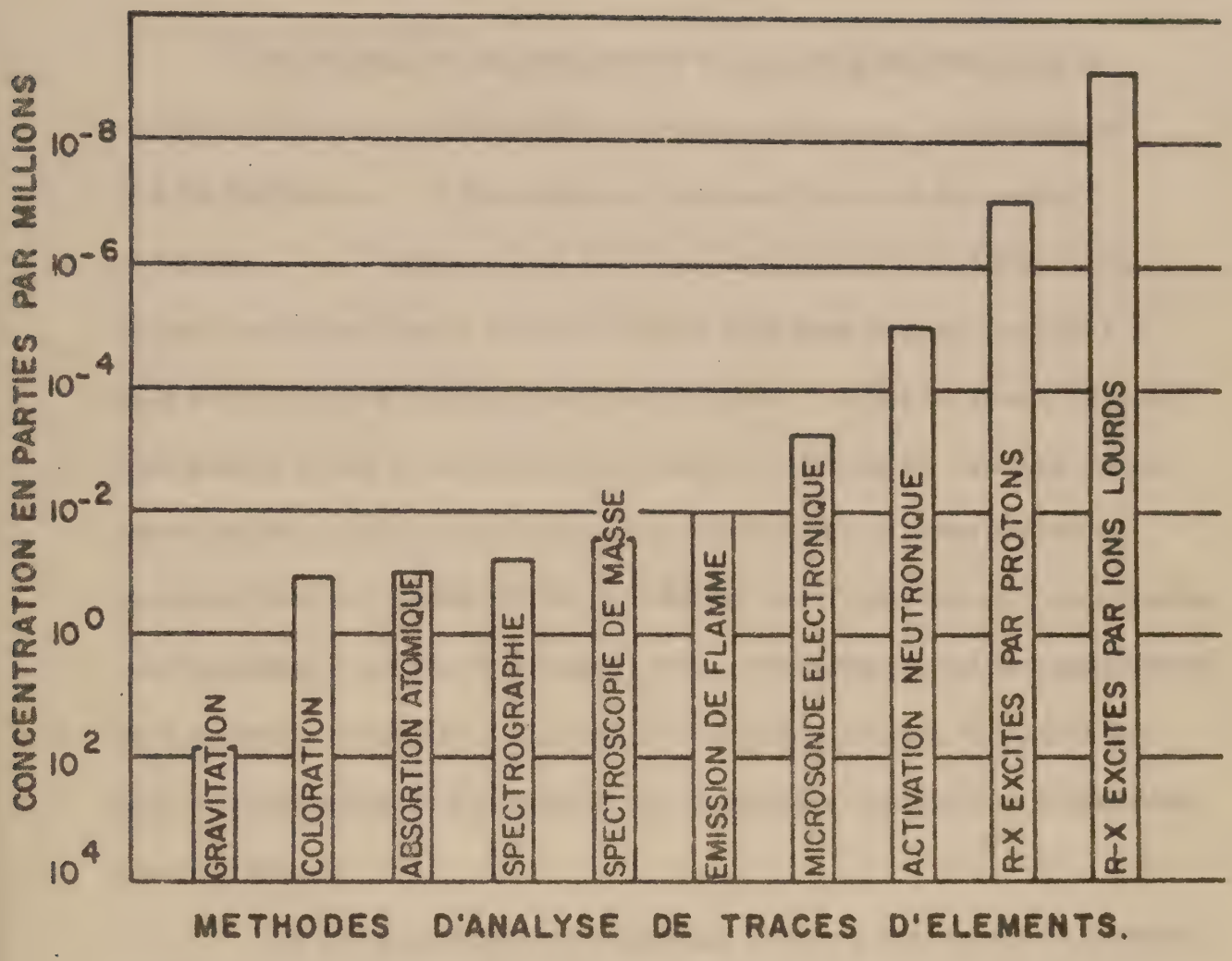
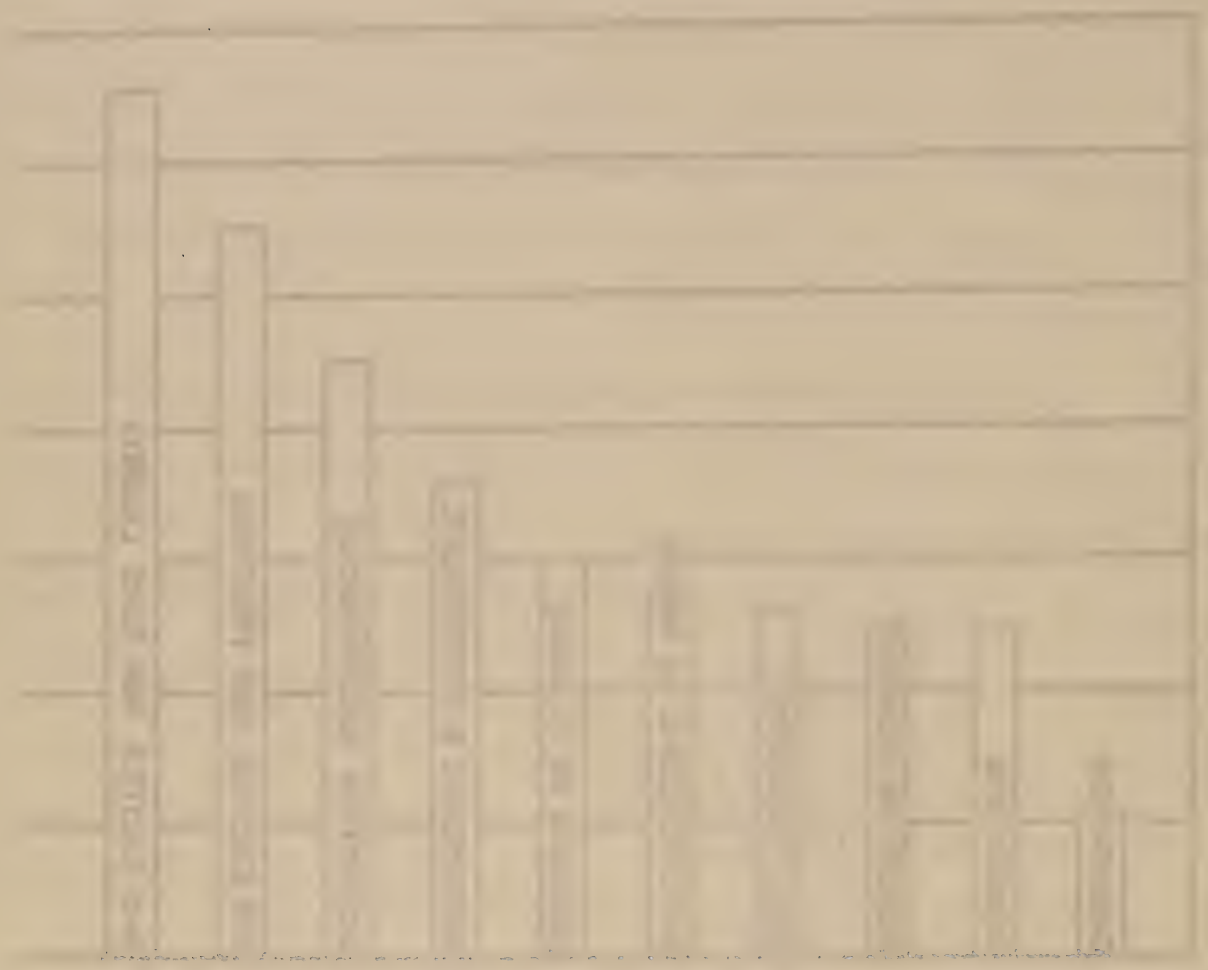


FIG.5 SENSIBILITE DES DIVERSES METHODES D'ANALYSE DE TRACES D'ELEMENTS.



4. Problèmes relatifs aux ions lourds

4.1 - Intérêt des ions lourds :

Les calculs de Merzbacher et de Garcia prévoient pour la création de vacances des sections efficaces énormes, de l'ordre de 10 à 10,000 barns. Si l'on pense en termes d'analyse de traces d'éléments, ces résultats sont très encourageants. Par ailleurs les calculs prévoient que la section efficace doit être proportionnelle à z^2 où z est le nombre atomique de l'ion incident. Même en tenant compte d'un effet d'écran du au fait que les ions du faisceau ne sont pas totalement ionisés, celà laisse prévoir un gain de près de deux ordres de grandeur dans la sensibilité de la méthode avec l'utilisation d'ions lourds tels l'oxygène. La figure 5 montre très schématiquement les sensibilités de différentes méthodes d'analyse de traces d'éléments et traduit fort bien la supériorité de l'excitation par particules chargées et notamment par ions lourds.

Un autre intérêt très important des ions lourds est de réduire sensiblement le bruit de fond. Ce dernier tient en effet pour une bonne part au "Bremstrahlung" produit lorsque les rayons deltas sont freinés dans la cible. Or le transfert maximum d'énergie dans la diffusion élastique d'électrons est donné par:

$$T_m = \frac{4Mm}{(M + m)^2} E$$

avec E énergie de l'ion incident

M masse de l'ion incident

m masse de l'électron.

Soit approximativement

$$T_m \sim 4m\,E/M$$

Ainsi des protons de 4 MeV produisent des électrons de recul de 8 keV apportant une contribution importante au bruit de fond dans le domaine d'énergie étudié. Par contre des ions oxygène ionisé cinq fois, de 20 MeV localisent le rayonnement de freinage en decà de 3 keV.

4.2 - Problèmes théoriques posés par l'utilisation d'ions lourds:

Si l'utilisation d'ions lourds se révèle expérimentalement très intéressante, elle pose par contre des problèmes théoriques délicats pour déterminer la section efficace de création de vacances. En effet, à basse énergie surtout, les sections efficaces mesurées sont de 10^2 à 10^4 fois supérieures à celles prévues dans le cadre d'une interaction coulombienne telle que l'ont calculée Merzbacher et Garcia. D'autre part les raies peuvent être déplacées, ce déplacement pouvant aller jusqu'à une valeur de 100 eV environ.. Enfin les rapports d'intensité des différentes raies d'un même élément varient d'autant plus que le projectile est plus lourd.

L'importante anomalie observée dans l'évaluation de la section efficace à basse énergie a été expliquée par un modèle proposé par Fano et Lichten[9].

Lors d'une collision entre deux ions lourds la quantité de mouvement du projectile passe par un minimum pour la plus petite distance d'approche des deux noyaux. Il est intéressant de comparer cette distance au rayon de la première orbite électronique de lacible en fonction du rapport des vitesses du projectile et de l'électron lié.
Le calcul [5] montre que pour

$$E / \lambda u_K > 1$$

ou ce qui est équivalent: $(v_0/v_K)^2 > 1$

E = énergie dans le centre de masse = $\mu v_0^2 / 2$

$\lambda = \mu/m_e$

la distance minimale d'approche est inférieure au rayon de la couche K de l'atome cible. Dans ce cas les forces coulombiennes dominent et une approche du type de celle développée dans le cadre de l'approximation de Born ou de l'approximation soudaine doit bien rendre compte des résultats expérimentaux.

Si par contre $(v_0/v_K)^2$ devient nettement inférieur à 1, la vitesse relative des deux atomes est lente vis-à-vis de la vitesse de l'électron

de la couche K , et ce dernier peut s'ajuster adiabatiquement sur le noyau du projectile. Il se forme dans ce cas un système quasimoléculaire pendant la durée de l'interaction et tout au long de l'approche de deux noyaux il se produit un réarrangement des orbites électroniques. Différents niveaux peuvent ainsi se croiser, livrant le passage pour les électrons de ces couches vers des orbites plus élevées. Il peut se créer ainsi des ionisations dans les couches profondes à basse énergie là où l'interaction de Coulomb seule se révèle inefficace. Il est intéressant pratiquement de distinguer trois zones:

- $E > \lambda u_K$: comme nous l'avons vu, la pénétration est profonde et l'interaction coulombienne est prépondérante.
- $\lambda u_I < E < \lambda u_K$: où u_I est la première énergie d'ionisation de l'atome. Dans ce cas une description moléculaire n'est valable que pour les couches les plus profondes et une interprétation théorique complète du phénomène se révèle très complexe. Il est probable toutefois que tant que E reste proche de λu_K le modèle de Garcia soit encore valable.
- $E < \lambda u_I$: ici tous les électrons peuvent s'ajuster adiabatiquement, et le modèle moléculaire est certainement le plus approprié.

Il reste donc à prévoir dans quelle zone de travail nous nous situons habituellement. Si l'on porte sur un graphique en coordonnées

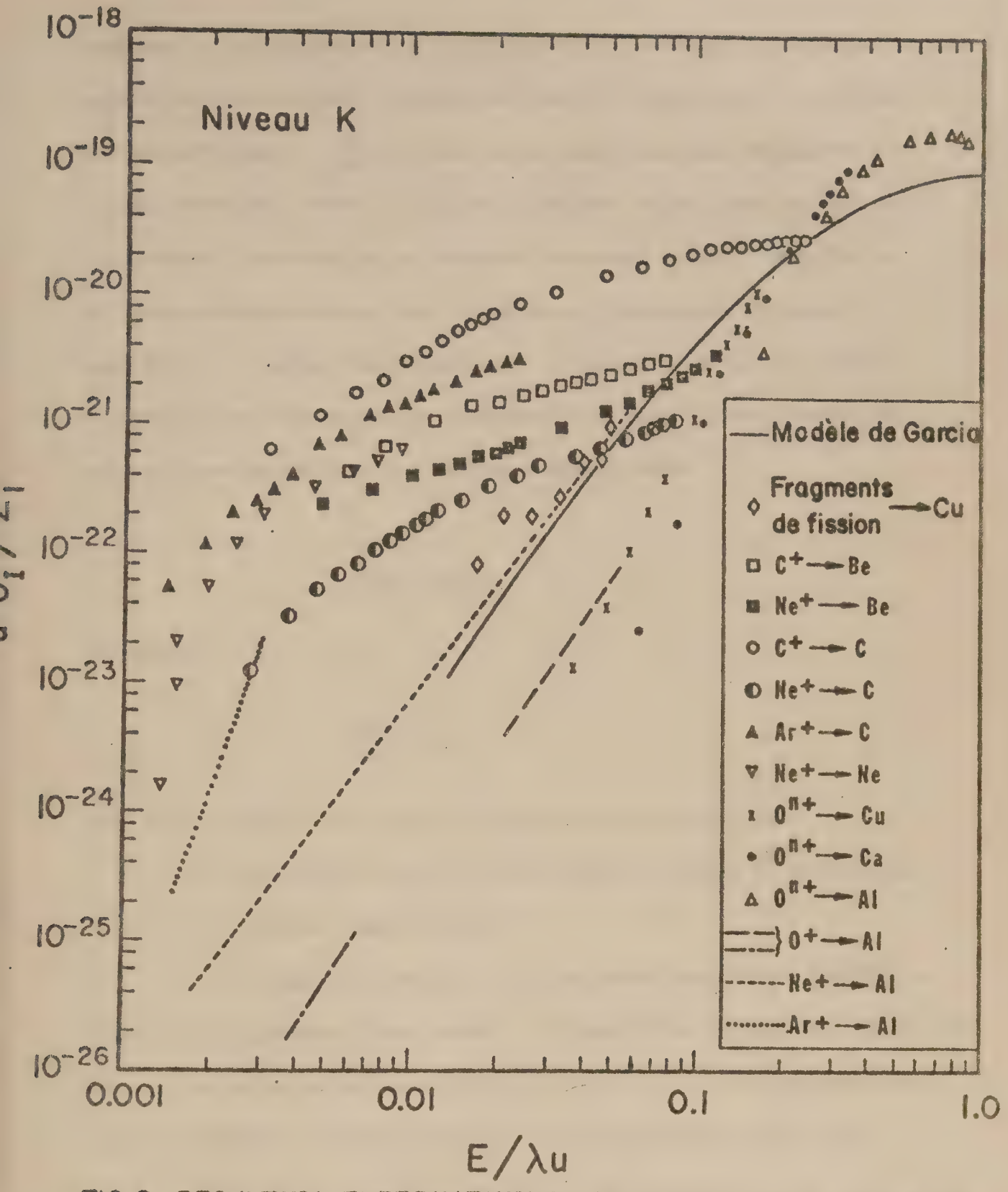


FIG. 6 RESULTATS EXPERIMENTAUX OBTENUES AVEC DES IONS LOURDS

réduites, la courbe théorique de Garcia et les résultats de plusieurs expérimentateurs ayant travaillé avec des ions lourds (fig.6) on remarque que déjà pour $\frac{E}{\lambda u} \geq 0.1$ les points expérimentaux rejoignent la courbe théorique. Pour un faisceau d'oxygène et une cible de Zinc, celà correspond à une énergie par nucléon d'au moins 2 MeV. Dans le cas du Tandem du laboratoire cette condition est pratiquement toujours satisfaite. Il semble donc opportun de continuer à utiliser le modèle de Garcia pour déterminer la section efficace dans le cas d'ions lourds sous réserve de vérifier la condition expérimentale:

$$\frac{E}{\lambda u} \geq 0.1$$

ou encore

$$\frac{E/\lambda'}{u} \geq 200$$

avec E/λ' = énergie par nucléon du faisceau exprimée en keV

u = énergie de liaison de l'électron de la couche K de l'élément à étudier exprimé en keV.

J'ai signalé au début de ce paragraphe deux autres problèmes relatifs à l'utilisation d'ions lourds. L'importance du premier semble faib dans le cas de la recherche de traces d'éléments. Le déplacement des raies n'excède pas en effet quelques dizaines d'électron-volts ce qui

correspond dans nos mesures à l'ordre de grandeur de l'incertitude liée à la position d'un pic.

Le déplacement est du à la structure fine de la raie et à l'importance variable prise par chacune des composantes suivant le faisceau utilisé.

Par contre les rapports d'intensité variables entre les différentes raies d'une même série, qui semblent reliés au degré plus ou moins grand d'ionisation de l'atome pourraient affecter sensiblement les résultats d'une analyse quantitative. En effet lors de collisions énergétiques, les couches extérieures sont presque complètement dégarnies et l'intensité des raies d'ordre élevé à l'intérieur de chaque série se trouve diminué. Or cet effet qui serait sans importance pour des raies d'ordre supérieur à deux, dont l'intensité est de toute façon très faible, peut diminuer de moitié l'intensité de la raie K_β dans certaines conditions. Malheureusement il existe très peu de résultats tant expérimentaux que théoriques relatifs à ce phénomène qui est jusqu'à présent connu uniquement de façon qualitative. Celà peut représenter une limitation dans l'évaluation précise des quantités d'éléments contenus dans une cible; il serait souhaitable d'effectuer plusieurs expériences dans ce sens afin de déterminer les lois de ces variations.

5. Conclusion

Les prévisions de Garcia ont porté initialement sur les sections efficaces de production de vacances dans la couche K. On peut se demander jusqu'à quel point ces résultats sont encore valables pour la couche L. Or les valeurs expérimentales sont en parfait accord avec le modèle de Garcia à condition de prendre en compte évidemment le rapport du nombre d'électrons dans la couche L, au nombre d'électrons dans la couche K, soit 4. Cette concordance peut paraître surprenante si l'on songe à la complication théorique qu'introduit la structure en trois sous niveaux de la raie L. Outre le fait que chaque sous-niveau est caractérisé par un moment angulaire différent et ne peut donc pas être considéré comme une fonction hydrogénoïde, les transitions de Coster-Krönig tendent à transférer les vacances produites dans le niveau LI vers les niveaux LII et LIII. Toutefois si l'on calcule la moyenne de la distribution des vitesses sur tous les moments angulaires pour un nombre quantique principal donné, on trouve un résultat analogue dans la forme à celui trouvé pour un état ls .

On pourra donc encore utiliser le modèle de Garcia à condition de considérer la couche globablement comme un niveau unique à huit électrons.

D'autre part la probabilité d'avoir une vacance dans la couche K, n'est pas égale à la probabilité d'émission d'un rayon X de type K.

En effet plusieurs processus entrent en compétition pour combler cette vacance, les plus importants étant l'émission radiative de rayons X et la production d'électrons Auger. Ce dernier mode appelé encore émission non radiative est un processus d'autoionisation du à l'interaction électrosta tique entre deux électrons d'un atome initialement ionisé une fois dans une couche profonde. L'estimation de la probabilité d'une telle transition a été effectuée dans le cadre de la théorie des perturbations par Wentzel (11) et par Kostroun, Chen et Crasemann (12). Le résultat du calcul permet de déterminer les rapports de fluorescence ω_K et ω_L, ou rapport entre la probabilité d'émission radiative et la probabilité d'émission d'électrons Auger pour des vacances de la couche K et de la couche L. Ainsi la section efficace réelle de production de rayons X peut s'écrire

$$\sigma_R = \sigma_v \, \omega$$

où σ_v est la section efficace de production de vacances calculée par Garcia. Dans les programmes de calculs j'ai introduit les valeurs du rapport de fluorescence correspondant aux travaux les plus récents. C'est ainsi que la plupart des valeurs de ω_K correspondent aux calculs de Kostroun , Chen et Crasemann [12].

Il ressort donc que dans la majorité des expériences, sous réserve de prendre quelques précautions dans le cas de l'utilisation d'ions lourds, le modèle de Garcia permet une détermination suffisamment bonne

Il resterait donc que dans la majorité des expériences, nous

de la section efficace de production de rayons X, pour effectuer des analyses quantitatives précises jusqu'à un très haut degré de sensibilité.

CHAPITRE III

MONTAGE EXPERIMENTAL

1. Introduction

L'énormité des sections efficaces prévues par la théorie démontre clairement l'intérêt de travailler avec des particules chargées et surtout des ions lourds. A ce point de vue le Laboratoire de Physique Nucléaire de l'Université de Montréal est bien placé, puisqu'il possède un accélérateur Tandem Van de Graaff qui peut fournir des faisceaux de protons d'alphas et d'ions lourds jusqu'au soufre. On obtient des énergies atteignant 12 MeV pour des protons et environ 60 MeV pour le soufre. Nous avons travaillé avec des faisceaux d'oxygène ionisé quatre fois ou cinq fois, avec des énergies respectives de 21 MeV et 34 MeV. Après avoir acheté un détecteur au Si(Li) en août 1972 le laboratoire disposait donc du matériel nécessaire à l'analyse de traces. Le but étant d'analyser rapidement un grand nombre d'échantillons, nous avons du construire un montage fonctionnel, disponible en permanence sur l'une des voies de l'accélérateur et dispensant au maximum l'expérimentateur de gestes routiniers. D'autre part la valeur élevée des taux de comptage (liés à la section efficace très forte) nous a conduits à apporter un soin tout particulier à l'électronique afin de travailler toujours dans les meilleures conditions de résolution et de sensibilité.

Enfin il a fallu développer des techniques de fabrication de cibles avec utilisation d'étalons dans le but d'effectuer des analyses quantitatives précises.

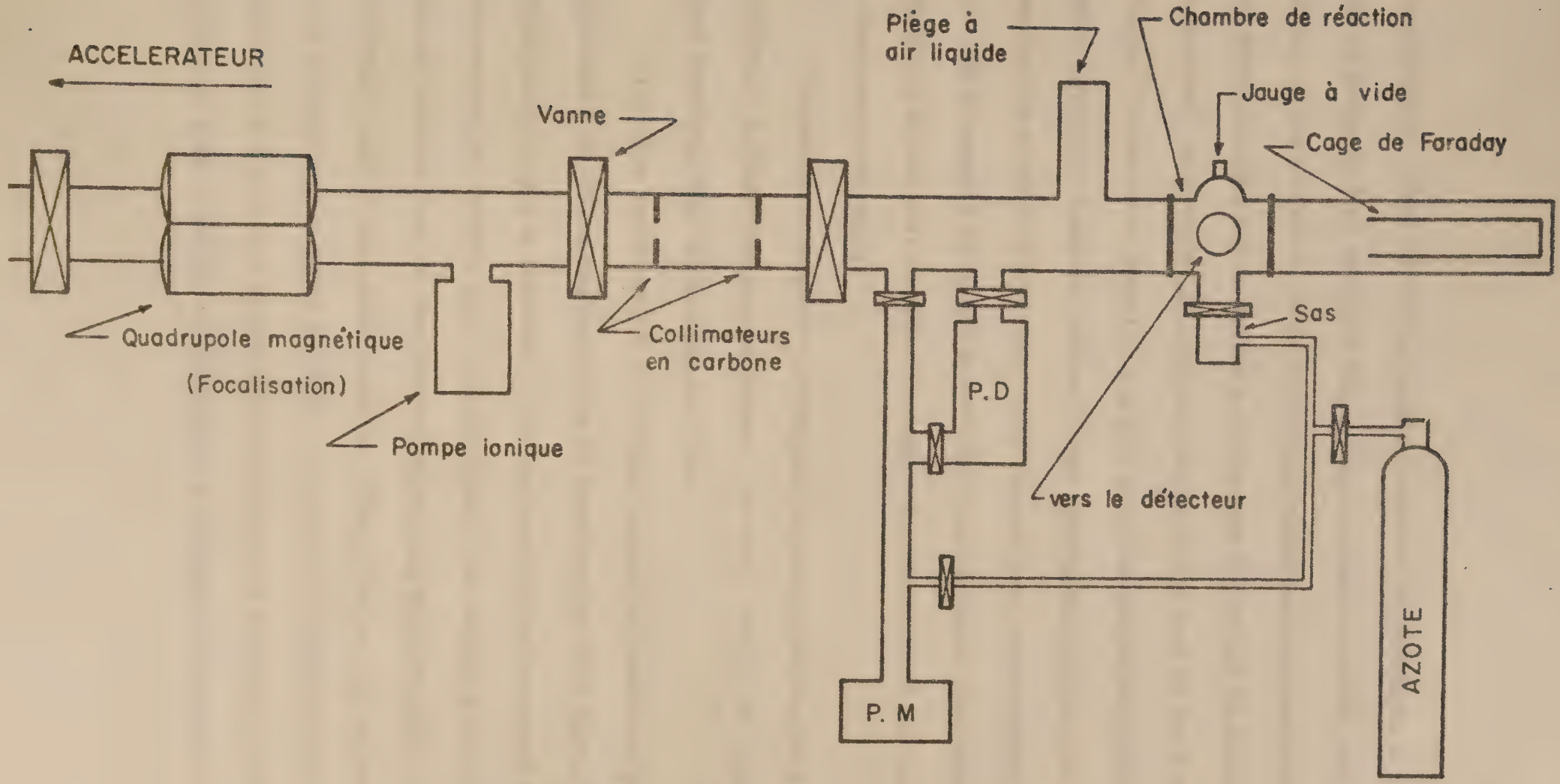
2.- Montage de la ligne

L'objectif principal dans la conception de la ligne de rayons X a été de réaliser un montage fonctionnel. En effet les taux de comptage sont très élevés et certaines cibles réclament des temps d'irradiation très courts, parfois de l'ordre d'une dizaine de minutes. D'autre part, il faut prévoir l'analyse d'un grand nombre d'échantillons. Il est donc important de réduire les pertes de temps entre les irradiations et d'éviter à l'expérimentateur tout déplacement et toute manipulation inutiles.

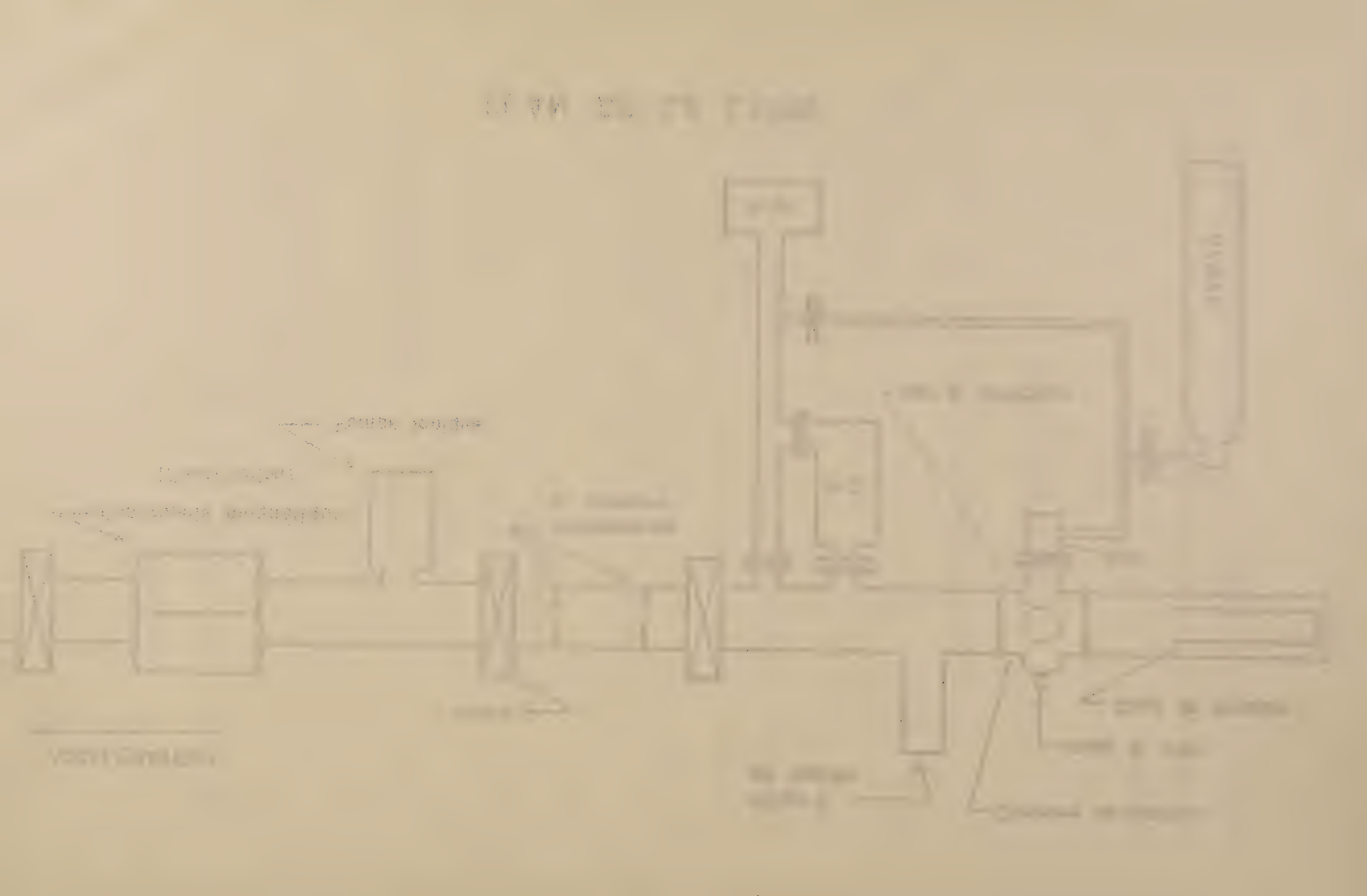
La ligne telle qu'elle est représentée sur la figure 7 comprend successivement:

- un aimant de focalisation
- un groupe de pompage
- un système de collimateurs
- une chambre de réaction sur laquelle est fixé le détecteur
- une cage de Faraday.

Le système à vide est constitué d'une pompe primaire mécanique, d'une pompe à diffusion, d'une pompe ionique et d'un certain nombre de jauges. L'accent a été tout particulièrement mis sur la compacité de cet



PLAN DE LA LIGNE



ensemble afin, d'une part d'augmenter la vitesse de pompage, et d'autre part de disposer d'un véritable tableau de commande avec les différentes vannes et les contrôles nécessaires rassemblés sur un espace réduit. Une dérivation du système à vide est branchée sur un sas de la chambre de réaction. Il est utile en effet de prévoir un sas pour ne pas avoir à casser le vide dans toute la ligne lors d'un changement de cible. Les cibles employées étant très minces et par conséquent fragiles, une canalisation de faible dimension a été choisie pour cette dérivation afin de ne pas provoquer de chutes de pression trop brutales. Une jauge est associée à ce sas pour contrôler la qualité du vide au cours des opérations de changement de cibles.

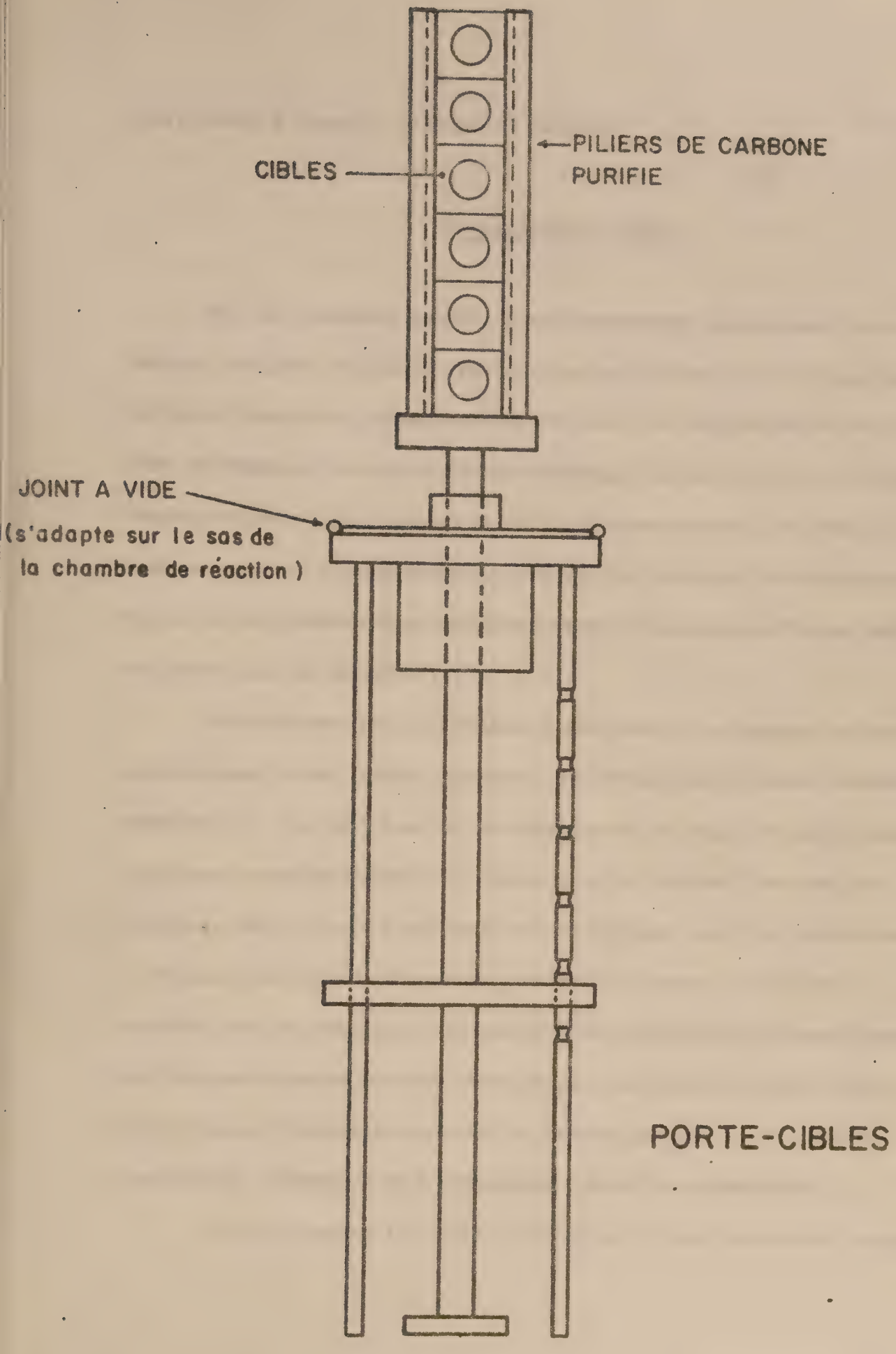
Signalons enfin que les opérations de mise à l'atmosphère s'effectuent à l'aide d'un circuit d'azote. En effet, l'azote est ensuite pompé beaucoup plus rapidement que l'air.

La haute sensibilité de la méthode impose de prendre de grandes précautions, afin de ne pas introduire de contaminants dans toutes les parties touchées par le faisceau. C'est pourquoi les collimateurs ont été construits en carbone de très haute pureté, les rayons-X caractéristiques du carbone étant de trop faible énergie pour etre détectés. Ces collimateurs sont de très petit diamètre (1/32, 2/32 et 3/32 de pouce) afin de réduire l'intensité du faisceau arrivant sur la cible; en effet, contrairement à beaucoup d'expériences de physique nucléaire, les taux de comptage sont si élevés qu'ils obligent à diminuer l'intensité du faisceau

afin de ne pas saturer l'électronique.

La chambre de réaction est une croix à six branches. Deux de ces branches permettent de l'insérer dans le reste de la ligne. Le détecteur vient s'y fixer, faisant avec l'axe de la ligne un angle de 90°. Le sas pour les cibles et une jauge à vide occupent deux autres branches. Une dernière branche reste libre. Elle pourra servir ultérieurement à l'installation d'un détecteur de particules chargées. La cage de Faraday située en bout de ligne ne permet en effet qu'une estimation approximative de la charge arrivant sur la cible en raison notamment de la variation du degré d'ionisation des particules qui la traversent. Un détecteur de particules chargées permettrait de mesurer cette charge avec une plus grande précision et d'accéder ainsi plus facilement à des mesures de sections efficaces totales.

Afin de diminuer le nombre de manipulations, nous avons prévu un porte cible (fig. 8) pouvant supporter six cibles différentes. Un système de verrouillage permet d'élever le support de cible de la hauteur exacte pour passer à la cible suivante; on peut aussi, tout en gardant la hau constante, faire varier l'angle entre la cible et l'axe du faisceau. Ce montage devrait permettre de mesurer éventuellement des corrélations angulaires puisque certains auteurs (13) ont signalé que l'émission de rayons X n'était pas toujours isotrope. Toujours afin d'éviter les contaminations, les piliers du porte cible et les supports de cible ont été construits en carbone très pur. Ce montage, certainement perfectible,



PORTE-CIBLES

FIG.8

s'est révélé à l'usage, pratique et efficace.

3. Préparation de cibles

Dès les premiers essais, il est rapidement apparu que l'on a intérêt à utiliser des cibles très minces de l'ordre de 10 à 100 $\mu g/cm^2$. En effet l'emploi de cibles épaisses entraine une augmentation très sensible du bruit de fond du au Bremsstrahlung. D'autre part, si l'épaisseur devient suffisante pour absorber une partie des rayons X excités, il peut se produire des phénomènes secondaires tels que l'absorption sélective ou le rehaussement de certaines raies. Un exemple d'un tel effet est donné dans le chapitre V.

D'autre part les échantillons à analyser se présentent le plus souvent sous forme liquide, gazeuse, ou même indéterminée (tissus) organiques). Il s'agit donc de les déposer sur un support mince constitué autant que possible d'éléments légers dont les rayons X ne sont pas détectés. Notre choix s'est porté sur le carbone, que l'on fait préparer en feuilles très minces (5 $\mu g/cm^2$) et sur le formvar. Ce dernier matériau est une substance organique (donc constituée d'atomes légers) que l'on peut étendre sur une nappe d'eau sous forme d'un film monomoléculaire. Toutefois la pureté du formvar semble souvent moins bonne que celle du carbone et on y trouve des traces de contaminants.

Pour préparer les cibles nous avons utilisé la méthode proposée

par Jolly et White (10). Les échantillons à étudier sont d'abord réduits à l'état de solution ou de suspension colloïdale dans un solvant inerte. La solution est ensuite placée dans un atomiseur qui la projette en gouttelettes microscopiques sur le support choisi. L'observation au microscope montre une répartition parfaitement homogène des différents éléments. Jolly et White (10) indiquent les méthodes de préparation pour différents types de matériaux.

L'avantage d'un tel procédé est qu'il permet d'étalonner très facilement les échantillons, en utilisant un élément dopant. Le dopage des cibles se révèle en effet indispensable si l'on désire faire des dosages exacts, en raison notamment de la difficulté de connaître le nombre de particules du faisceau ayant frappé la cible. Cette méthode de comparaison permet en outre d'éliminer l'influence d'effets parasites et de facteurs géométriques. Elle permet d'autre part de résoudre un problème très important lié à la section efficace. En effet la relation de Garcia fournit en fonction des données expérimentales la valeur de $\frac{u^2\sigma}{Z^2}$ où Z est la charge de l'ion incident. Mais la charge effective de cet ion vue par l'électron lié est très difficile à connaître surtout avec des ions lourds qui ne sont pas totalement ionisés. Il faut tenir compte d'un facteur d'écran qui doit être variable au moment de l'interaction où l'interpénétration des couches électroniques est plus ou moins grande. Or avec des conditions de faisceau données cet effet est vraisemblement le même

pour tous les éléments et l'utilisation d'une méthode différentielle permet de s'en affranchir.

4. Le détecteur

Deux caractéristiques essentielles du système de détection imposent leur limite dans la recherche de traces d'éléments:

- la résolution en énergie, qui fixe la limite de séparation des pics de deux éléments voisins.
- le bruit de fond, qui peut couvrir certains pics de faible intensité, s'il est trop important.

Les récents progrès de l'électronique et de la technologie des semi-conducteurs ont permis de construire depuis une dizaine d'années des détecteurs très performants, parfaitement adaptés à l'analyse de traces d'éléments.

Le laboratoire a acheté récemment un détecteur Ortec au Si(Li), de 160 eV de résolution mesurée à 5.9 keV avec un taux de comptage de 1000 coups par seconde et une largeur d'impulsion à l'amplificateur de 10 μs. La courbe de réponse, ou efficacité du détecteur, est représentée sur la figure (9). Les diminutions de sensibilité à basse et à haute énergie sont dues à l'absorption dans la fenêtre de Beryllium et dans le cristal lui-même. Cette courbe montre clairement que l'on peut analyser

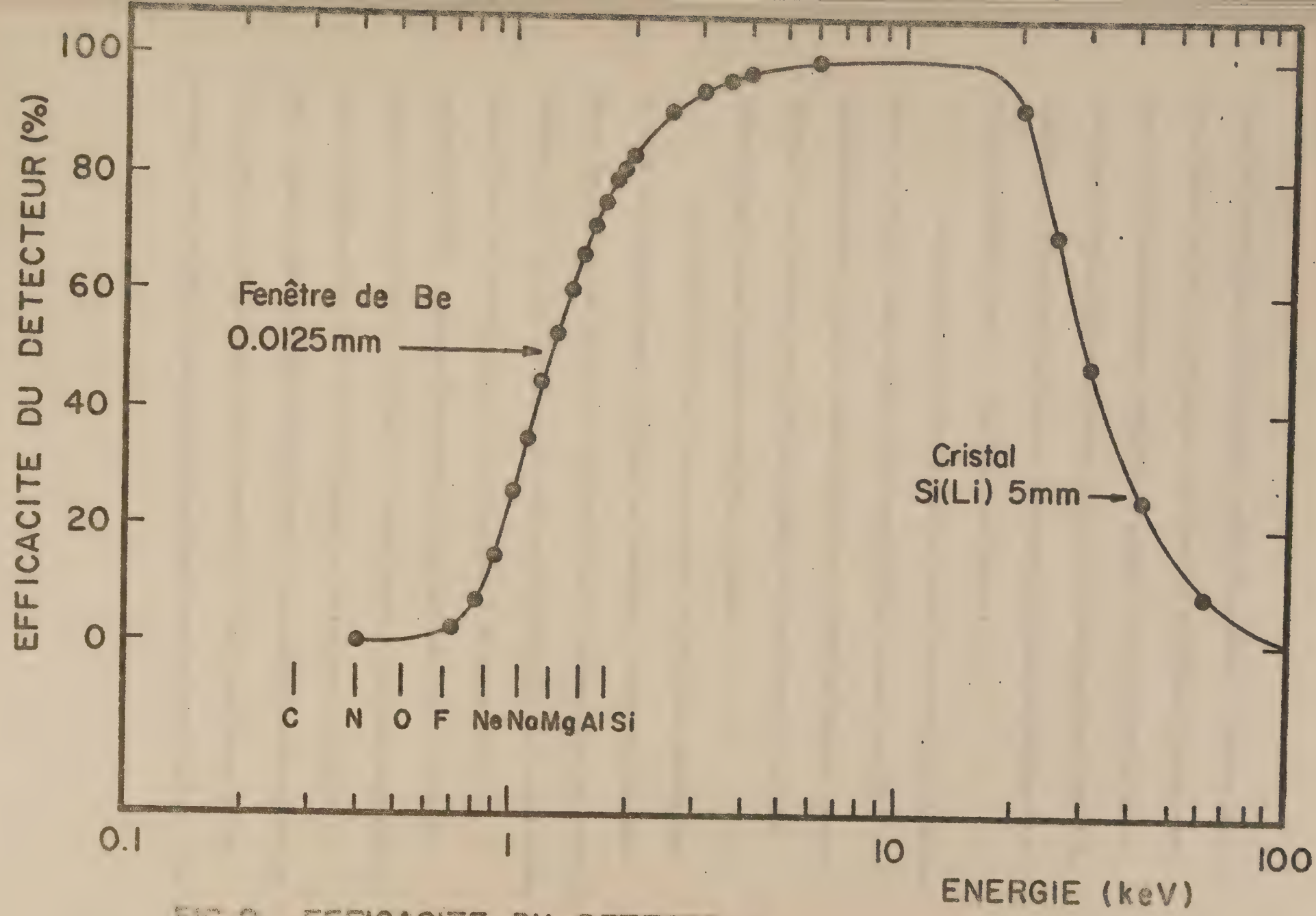


FIG 9 EFFICACITE DU DETECTEUR

sans difficulté tous les éléments à partir du sodium. D'autre part, dans cette région, la résolution nous permet de séparer facilement les pics caractéristiques d'éléments voisins. (La séparation entre les pics de deux éléments voisins est en effet une fonction à peu près linéaire et croissante du nombre atomique; les pics deviennent donc très rapprochés pour des éléments légers).

Le processus le plus important pour l'absorption de photons dans le cristal, dans le domaine d'énergie des rayons X est l'effet photoélectrique. Chaque photon produit un nombre de charges proportionnel à son énergie, qui sont collectées sur deux faces du cristal entre lesquelles est appliquée une haute tension.

La résolution à une énergie donnée dépend très étroitement du taux de comptage total, à toutes les énergies. A taux de comptage élevé, la résolution est liée au type de contre réaction dans le préamplificateur. La fig. (10) montre, en fonction de l'énergie, les contributions respectives de l'électronique et du détecteur à la résolution. Le préamplificateur comprend essentiellement un transistor à effet de champ à très bas bruit, refroidi à l'azote liquide, avec une capacité de contre-réaction afin d'intégrer la charge collectée par le détecteur. Cette capacité doit être très faible devant la capacité d'entrée du circuit, si l'on veut pouvoir négliger cette dernière. A des taux de comptage élevés il faut limiter la charge qui s'accumule sur le condensateur. Cette

limitation peut être effectuée soit de façon continue, soit par intermittence (fig. 11). Dans le premier cas une résistance est montée en parallèle aux bornes de la capacité, mais celà présente l'inconvénient d'augmenter le bruit et de détériorer la résolution. Le deuxième montage comprend à la sortie du circuit un contrôleur de niveau qui commande une photodiode dès que la charge devient trop importante. Cette dernière agit par couplage optique avec le drain du FET qui offre alors pendant un court instant une résistance faible aux bornes du condensateur. Pendant cette opération une impulsion est envoyée vers un système de réjection afin d'interdire le comptage Ces nouvelles techniques très récentes décrites par Goulding (14) permettent d'obtenir des résolutions de l'ordre de 100 eV.

La partie du bruit de fond observé dans les spectres due à l'électronique, est à rattacher essentiellement à un défaut dans la collection des charges. Le champ appliqué au cristal n'est pas partout homogène en raison d'effets de surface encore inconnus, et certaines charges peuvent être perdues sur les côtés du cristal avant d'être collectées. Ce défaut a été considérablement diminué par l'utilisation d'un anneau de garde qui rend le champ beaucoup plus homogène; on a pu ainsi diminuer le bruit de fond par un facteur 10. Goulding signale que la répulsion électrostatique entre les différentes charges produites par un même photon, risquent de faire perdre quelques-unes de celles-ci

au niveau de l'anneau de garde (fig. 12). Il a donc monté un système de discrimination entre l'anneau et la partie sensible, qui lui a fait gagner encore un facteur 5 dans le bruit.

Les progrès dans la technologie des détecteurs se poursuivent constamment. On parle de plus en plus de détecteurs permettant d'analyser des éléments légers (azote, oxygène, carbone), de résolutions inférieures à 100 eV, et il est probable que dans de brefs délais, les analystes auront à leur disposition des appareils extrêmement performants pour la recherche de traces d'éléments.

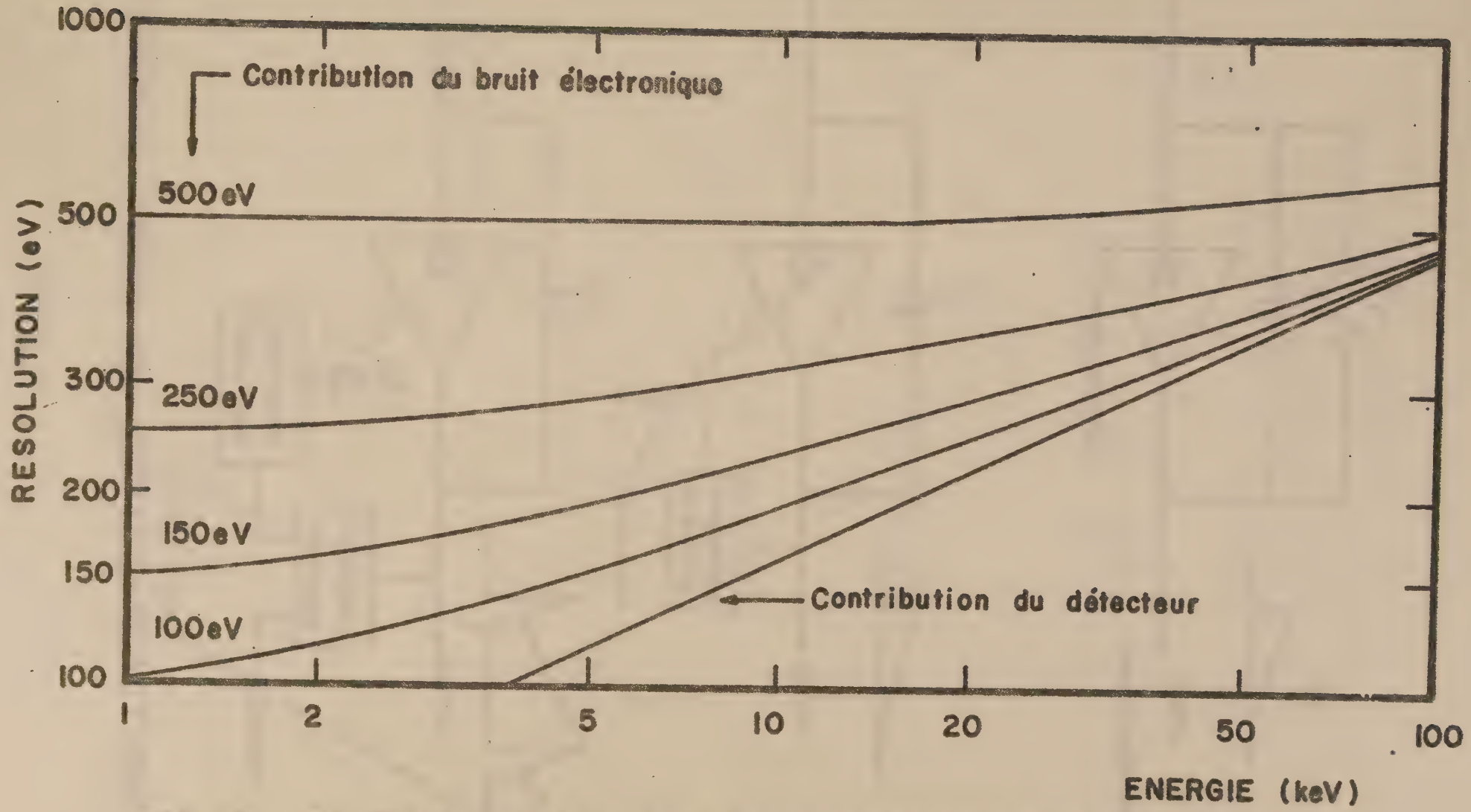
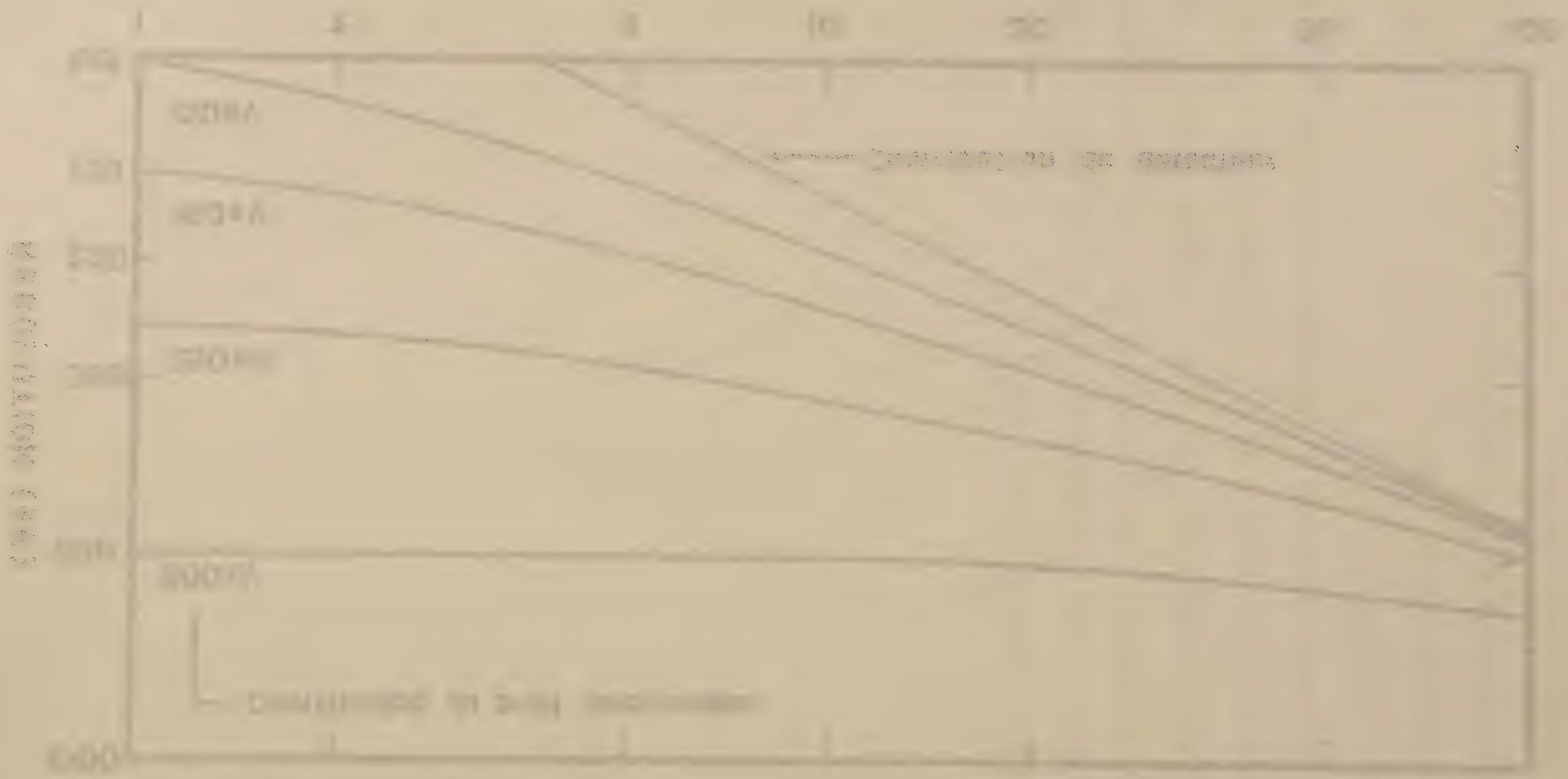
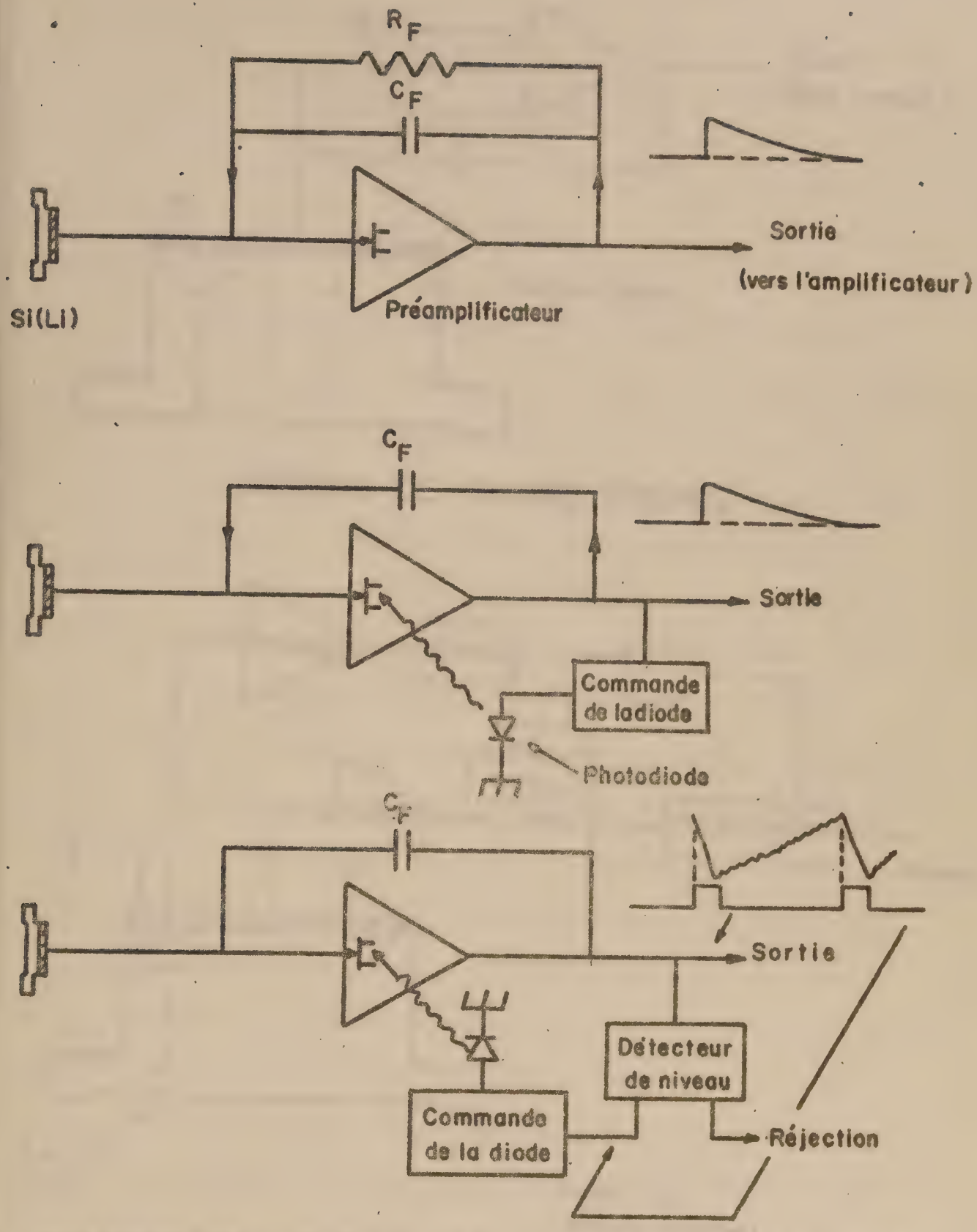


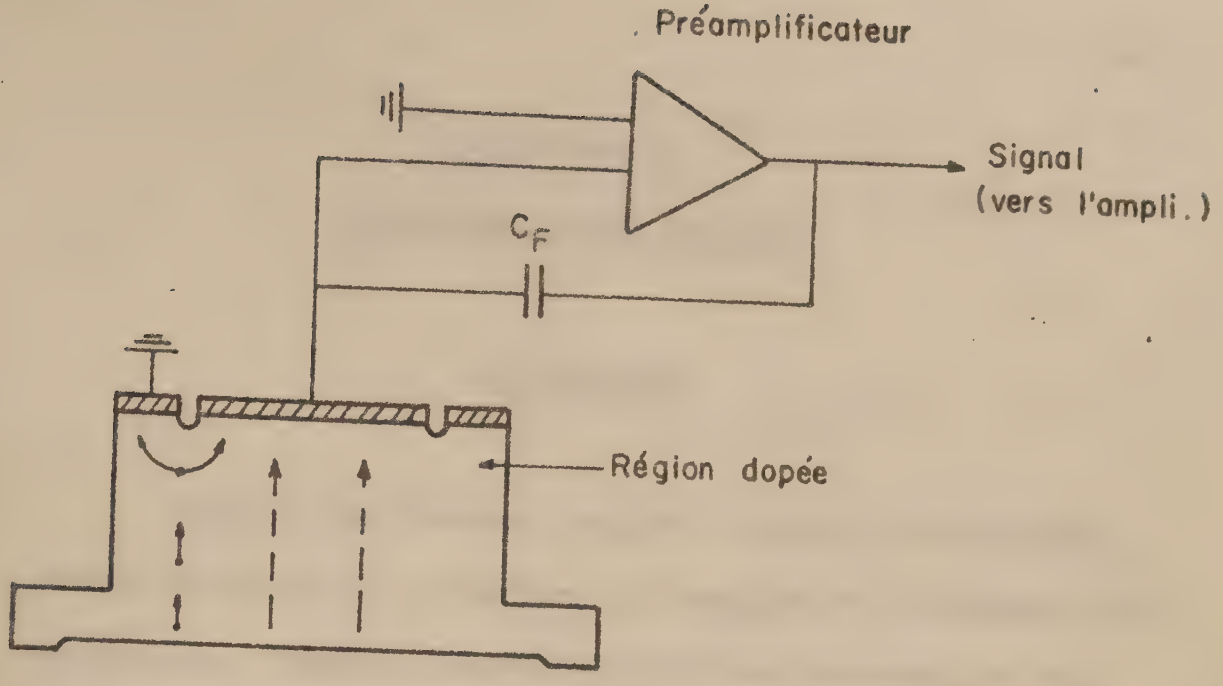
FIG.10 CONTRIBUTIONS DE L'ELECTRONIQUE ET DU DETECTEUR A LA RESOLUTION.



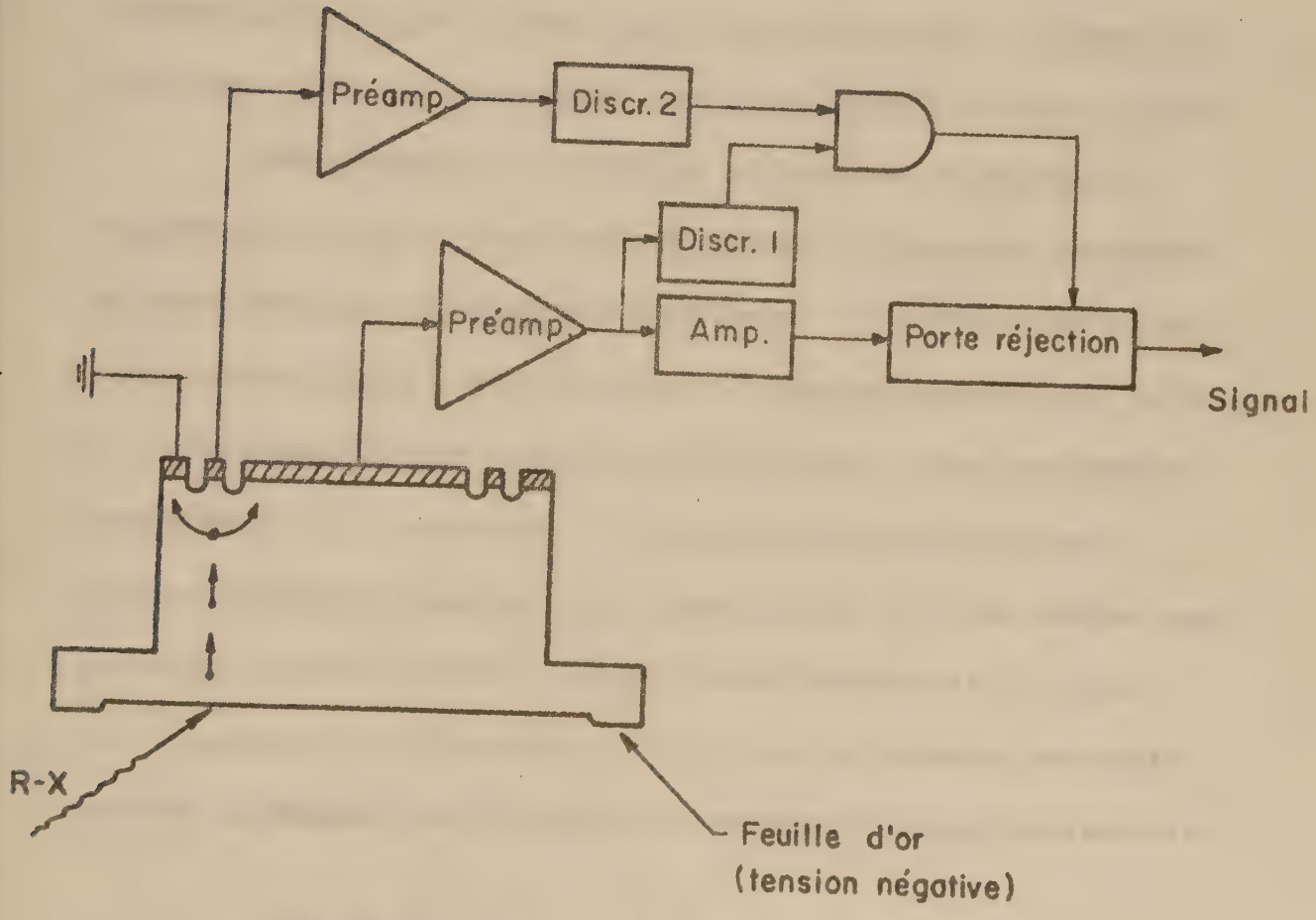


DIFFERENTS TYPES DE CONTRE-REACTIONS

FIG. 11



ANNEAU DE GARDE SIMPLE



ANNEAU DE GARDE DOUBLE

FIG. 12

CHAPITRE IV

PROGRAMMES DE CALCUL

1. Introduction

Une méthode d'analyse, pour être rentable, se doit d'automatiser au maximum la procédure de dépouillement et d'interprétation des données. Toutefois l'expérimentateur doit conserver une très grande liberté d'intervention, qu'il s'agisse de l'étalonnage en énergie des spectres, de la recherche sélective de tel ou tel élément, de l'identification d'un pic ou d'un calcul de concentrations. Chaque expérience étant courte, il faut aussi prévoir un système simple et rapide.

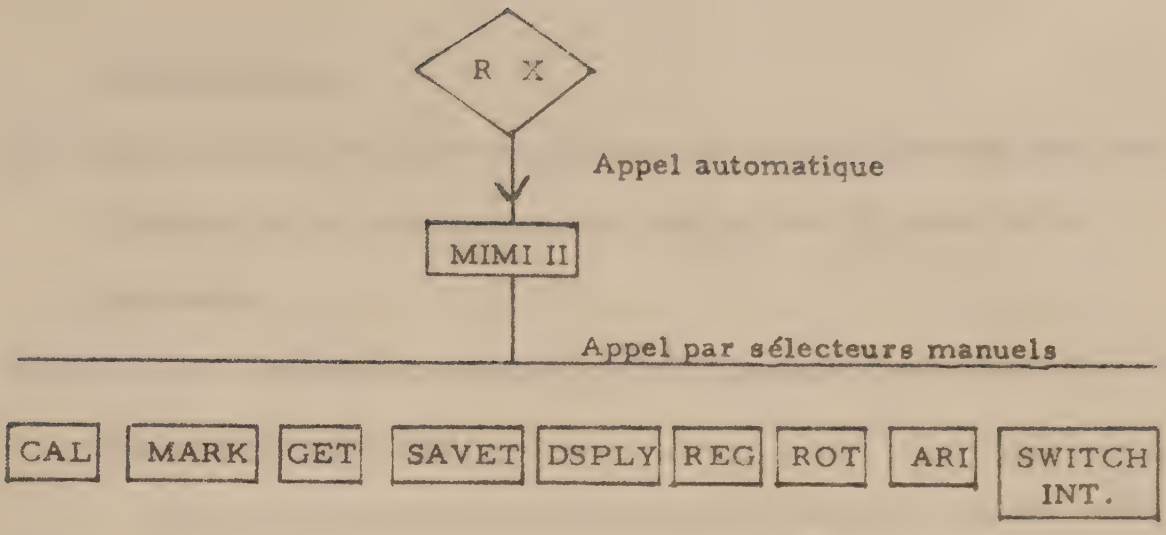
Les possibilités matérielles offertes par le laboratoire (un ordinateur CDC 3100 en ligne avec bientôt un deuxième ordinateur du même type pour le traitement hors ligne, un télétype, une imprimante rapide Gould, quatre dérouleurs de bandes magnétiques, un écran de visualisation DD16) m'ont permis de développer deux systèmes de programmes (21). Le premier destiné à fonctionner en cours d'accumulation des données, est orienté surtout vers une analyse qualitative des résultats obtenus; l'autre, devant fonctionner hors ligne (en raison notamment du temps et de la capacité mémoire demandés) effectue un dépouillement qualitatif et quantitatif complet de spectres.

Le rôle de l'expérimentateur consiste simplement à choisir à l'intérieur de ces deux ensembles, les programmes à utiliser et à interpréter les résultats de l'analyse.

2. Programme d'analyse qualitative

Ce programme est essentiellement centré sur les possibilités qu'offre l'écran de visualisation DD16. Il utilise pour une bonne part le système déjà existant de gestion des données, ou système de Minnesota en modifiant certaines sous-routines et en introduisant des programmes supplémentaires.

Une expérience de rayons X peut durer moins de dix minutes. Mais il est important que pendant ce temps l'expérimentateur puisse étalonner son spectre et faire une étude qualitative sommaire. Celà implique une grande simplification dans le chargement et l'appel des programmes et une réduction importante du dialogue au télétype qui doit pourtant rester clair et sans équivoque. C'est pourquoi, après chargement du programme principal, chaque sous programme peut être appelé manuellement au moyen d'un jeu de sélecteurs situés sur le DD16. Le schéma d'ensemble est le suivant:



R X est le programme principal. Son rôle consiste à lire une table de Mendéleev , avec un certain nombre d'informations pour chaque élément tels la masse, le nombre atomique, les énergies de liaison des couches profondes et les énergies des rayons X caractéristiques. Il est conçu pour reconnaître un élément à la simple lecture de son symbole chimique. Il appelle enfin MIMI II.

MIMI II est une nouvelle version du programme existant appelé MIMI. Son rôle consiste à gérer tout un ensemble de sous programmes appelés par sélecteurs en contrôlant constamment l'état de ces sélecteurs.

Parmi l'ensemble des sous-routines appelées par clé, REG, ROT, ARI, SWITCH INT. existaient déjà et n'ont pas été modifiées. Très sommairement elles réalisent les fonctions suivantes:

REG: sert à définir la région de mémoire dans laquelle on veut stocker un spectre.

ROT: dans le cas où plusieurs régions ont été définies, cette clé permet de visualiser successivement les spectres accumulés dans

chacune d'elles.

ARI: peut réaliser une opération linéaire entre deux spectres telle que l'addition ou la soustraction avec des facteurs de pondération différents.

SWITCH INT: redonne le contrôle à MIMI II lorsque l'on veut sortir d'un sous-programme.

Les cinq premiers sous-programmes indiqués sont soit entièrement nouveaux (CAL et MARK) soit modifiés (GET, SAVET, DSPLY).

CAL: est un programme d'étalonnage en énergie. Il permet de pointer jusqu'à vingt points au crayon lumineux, d'afficher au télétype les énergies correspondantes, puis il calcule par les moindres carrés les paramètres d'une droite passant par ces points.

Les spectres sont en effet pratiquement linéaires sauf peut-être à très basse énergie et l'on commet une erreur plus faible sur la partie intéressante en faisant passer une droite qu'en cherchant un polynôme de degré plus élevé. Les deux paramètres de la droite sont rangés dans un vecteur protégé de la mémoire à un rang correspondant à la région où le spectre est stocké. Il est donc possible de conserver ces paramètres pour plusieurs expériences successives sans avoir à refaire l'étalonnage à condition d'accumuler les spectres toujours dans la même région. J'ai tenu aussi à ce que ces paramètres puissent être associés à chaque spectre aussi longtemps qu'on le désire, au même titre que les

identificateurs. Ainsi lors du stockage du spectre sur bande magnétique, l'ordonnée à l'origine et la pente de la droite d'étalonnage sont rangées dans les deux premiers canaux. A tout moment on peut donc disposer d'un spectre qui a été étalonné une fois pour toutes. Celà a nécessité une légère modification des sous-routines GET et SAVET dont la fonction consiste soit à déposer un spectre sur une bande magnétique, soit à chercher un spectre donné sur celle-ci.

Le sous-programme DSPLY, dont le rôle est de visualiser le spectre sur l'écran a lui aussi subi quelques transformations. Il est maintenant possible en pointant un canal au crayon lumineux d'afficher sur l'écran le numéro du canal, le nombre de coups comptés dans ce canal et l'énergie correspondante, cette dernière uniquement si l'étalonnage a été effectué.

MARK: est un sous-programme beaucoup plus spécifique aux expériences sur les rayons X. Il utilise lui aussi les résultats de l'étalonnage et peut fonctionner selon deux modes. Pour le premier mode, on a la possibilité d'afficher sur le DD16 deux marqueurs de hauteurs différentes correspondant aux raies K_α et K_β d'un élément donné dont le symbole s'inscrit dans un coin de l'écran. Le choix de l'élément se fait au télétype en inscrivant son symbole chimique. Les marqueurs se positionnent automatiquement aux énergies convenables et permettent de voir si l'élément est présent ou non. Il est possible alors, par un jeu de

contacteurs de parcourir la classification de Mendéleev dans un sens ou dans l'autre à partir de l'élément préalablement sélectionné, ou de redonner le contrôle au télétype et de rechercher un autre corps.

Dans le deuxième mode, un seul marqueur s'affiche au milieu du spectre . Il est alors possible en jouant avec les mêmes contacteurs que précédemment, de le déplacer plus ou moins vite, dans un sens ou dans l'autre jusqu'à l'amener en coincidence avec un pic. Une fenêtre d'énergie (correspondant à l'incertitude sur la position) est alors définie et centrée sur ce pic, et l'imprimante construit un tableau donnant pour cette raie toutes les identifications possibles, compatibles avec la fenêtre d'énergie.

Une analyse qualitative peut être ainsi effectuée très rapidement et avec la plus grande facilité pour l'expérimentateur qui garde à chaque instant une très grande liberté d'action vis-à-vis d'un spectre.

3. Programmes d'analyse quantitative

Cet ensemble de trois programmes, destinés à fonctionner hors ligne à partir des spectres stockés sur une bande magnétique, doit permettre une analyse quantitative complète de chaque spectre comprenant la recherche de tous les pics, même très faibles, le calcul de leur position exacte et de leur surface et le calcul des concentrations relatives des différents éléments. Toute cette procédure est entièrement automatique et ne nécessite l'intervention de l'opérateur que pour indiquer les paramètres de l'expérience. Les deux premiers programmes, Finding et Fitting ont été construits à partir de la description faite par Mariscotti (15).

Compte tenu de la haute résolution du détecteur, on peut supposer, sans commettre une erreur importante que le bruit de fond sous chaque pic est linéaire. Dans ces conditions le nombre de coups comptés dans le canal x peut s'écrire:

$$N(x) = G(x) + B + Cx$$

où $G(x)$ est une gaussienne s'il y a un pic, ou zéro s'il n'y en a pas. On voit donc que la dérivée seconde de $N(x)$ fournira toutes les indications utiles à la recherche des raies. Elle sera en effet non nulle uniquement dans la région d'un pic.

La nature discrète des données impose de prendre pour dérivée seconde:

$$S_i = N_{i+1} - 2N_i + N_{i-1}$$

où i est le numéro de canal.

Malheureusement la fluctuation F_i de cette fonction est comparable à la valeur de S_i:

$$F_i = (N_{i+1} + 4N_i + N_{i-1})^{\frac{1}{2}}$$

Il faut donc modifier la fonction S_i pour reduire la déviation standard. C'est pourquoi on utilise plutôt la fonction:

$$S_i(z,w) = \underbrace{\sum_{j=i-m}^{i+m} \cdots \sum_{n=\ell-m}^{\ell+m}}_{z} S_n$$

où $w = 2m + 1$

Un choix judicieux des paramètres z et w permet de fixer la valeur de la déviation standard de $S_i(z,w)$ et partant, la hauteur minimale des pics que l'on veut analyser.

Le programme Finding recherche tous les pics dans un spectre ou une région de spectre. Il donne à l'imprimante pour chaque pic trouvé, sa position en numéro de canal, et la surface approximative rapportée

au pic le plus intense. Il charge sur une bande magnétique les paramètres correspondants à chacune des raies analysées. Dans un très proche avenir Finding sera aussi en mesure de corriger le spectre de la courbe de réponse du détecteur.

Fitting lit ces dernières valeurs sur le ruban et par itérations successives calcule la gaussienne la mieux adaptée à chacun des pics avec un bruit de fond parabolique. Il permet aussi de résoudre des doublets. Il recalcule enfin avec précision la position du centre des pics, l'énergie correspondante, les hauteurs et les surfaces. Un tableau final donnant tous ces résultats accompagnés de leurs erreurs est donné à l'imprimante; on peut y lire aussi le nombre d'itérations effectives et le nombre de canaux occupés par chaque pic. Bientôt un sous-programme de Fitting identifiera chaque pic à toutes les raies possibles d'éléments connus. Le résultat sera imprimé dans un deuxième tableau. Les listings des programmes sont donnés en appendice. Signalons que ces deux programmes peuvent imprimer sur option tous les résultats intermédiaires des calculs.

Le dernier programme, SIGMA, calcule pour chaque élément identifié et en fonction des paramètres expérimentaux les sections efficaces par la méthode de Garcia en utilisant une table de rapports de fluorescence ω. Il reprend alors les résultats fournis par Fitting pour déterminer les concentrations relatives des différents éléments identifiés

dans le spectre.

Il est donc possible par le jeu de cet ensemble cohérent de programmes de mener à bien une analyse quantitative complète avec le minimum d'intervention extérieure. Pour une cible normale on peut compter en moyenne sur une irradiation d'une vingtaine de minutes, et un temps de traitement des données de dix minutes environ. Celà représente une durée totale pour l'analyse très faible qui rend cette méthode extrêmement performante.

CHAPITRE V

EXEMPLES DE RESULTATS OBTENUS

1. Introduction

Il est difficile et hasardeux, lors du démarrage d'un nouveau programme de recherche d'entreprendre immédiatement des expériences originales. Au cours de cette première année, perturbée d'ailleurs par un arrêt prolongé de l'accélérateur, l'accent a été surtout placé sur l'optimisation des conditions expérimentales et la mise en place des programmes d'analyse.

Toutefois dès les premiers essais, des résultats extrêmement encourageants ont été enregistrés dont je reproduis ici deux volets. Il s'agit, d'une part, d'une analyse d'eau minérale, et d'autre part de la mise en évidence d'effets de rehaussement de raies dans des cibles épaisses.

2. Etude d'une eau minérale

Une telle étude a été entreprise, d'une part pour l'intérêt qu'elle peut présenter sur le plan écologique; d'autre part une analyse similaire a été effectuée à Strasbourg (16) avec un faisceau de protons et il a paru souhaitable de pouvoir comparer les résultats.

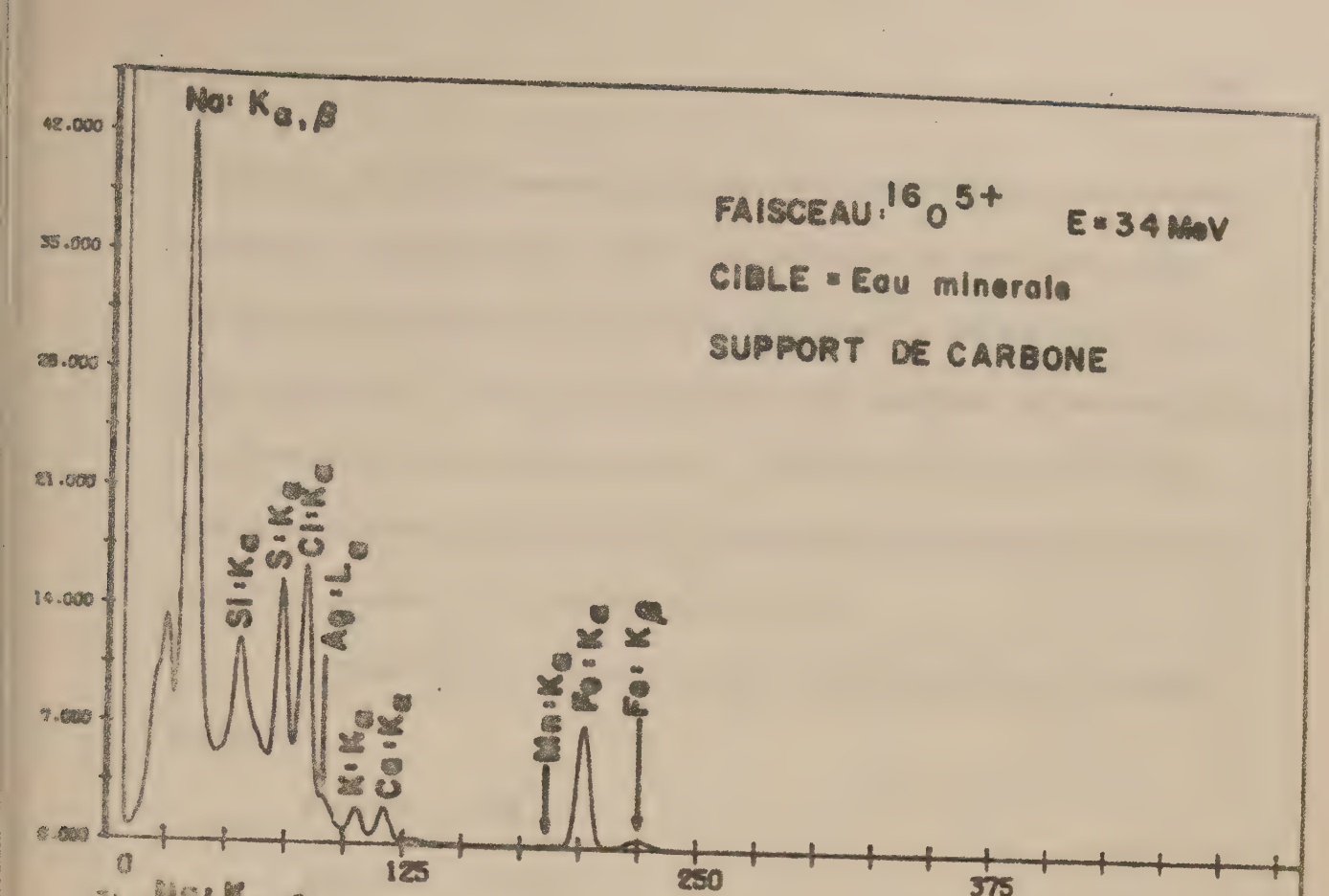
Environ 140 µg d'un échantillon d'eau de Vichy-Célestin ont été pulvérisés en très fines gouttelettes sur un support de 10 $\mu g/cm^2$ de carbone. L'eau avait été préalablement dopée avec une solution de nitrate de Césium dans la proportion de 500 parties par million de Césium.

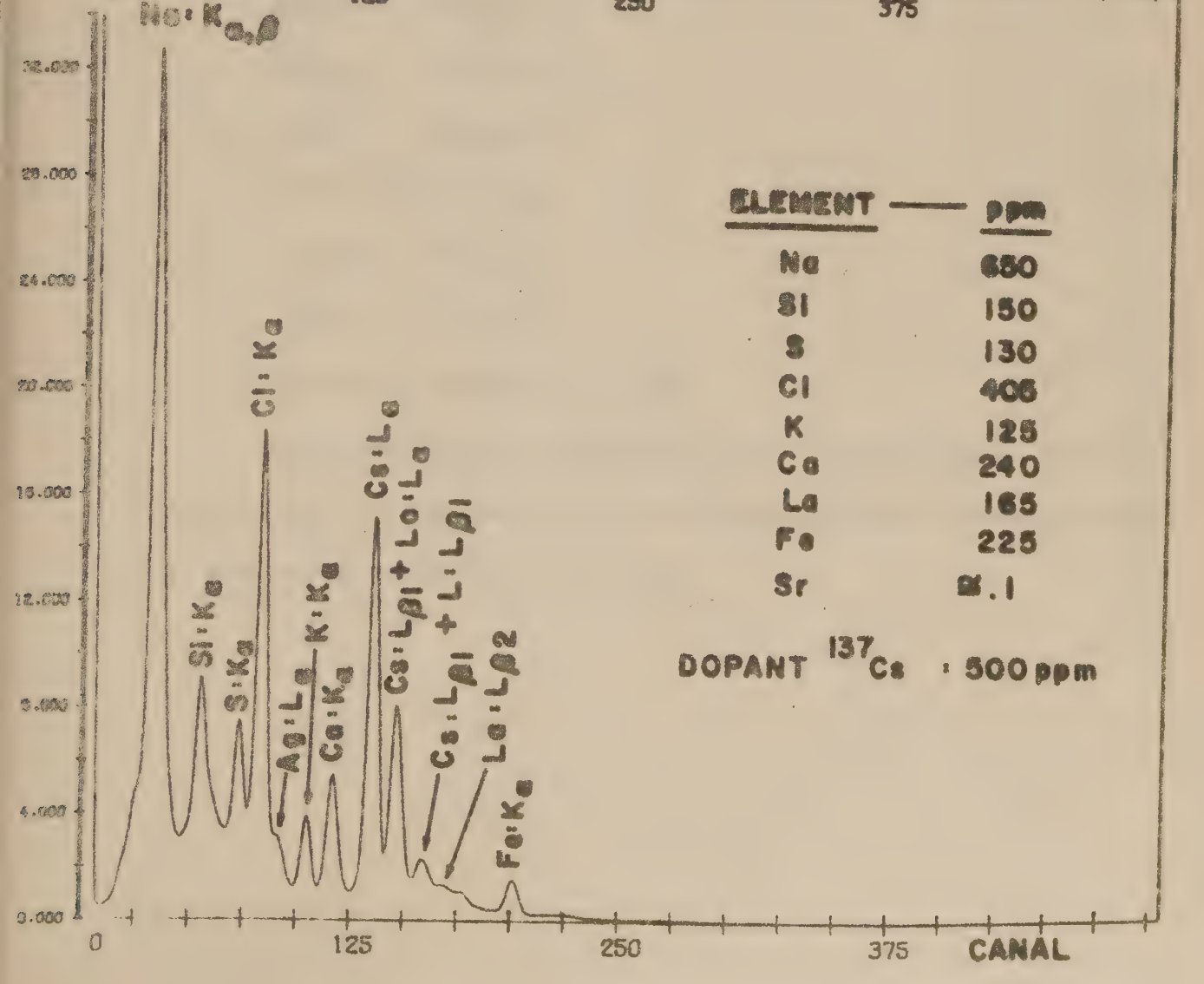
Le faisceau choisi était constitué d'oxygène cinq fois ionisé avec une énergie totale de 34 MeV. Ce choix devait permettre d'obtenir la possibilité maximale pour l'analyse d'éléments légers. En effet pour des énergies de liaison de quelques kilo électrons volts celà nous situe pratiquement au maximum de la courbe de Garcia avec une section efficace pour le sodium de 2.5×10^6 barns.

La figure (13) montre le spectre obtenu après un temps d'accumulation de 50 minutes.

Le pic assez intense du fer au milieu du spectre vient vraisemblablement du support de cible, qui, exceptionnellement, n'était pas en carbone, mais en acier. Il aurait pu être excité soit directement par le faisceau, soit par les rayons X émis par la cible elle-même.

L'examen visuel révèle déjà la présence inconstestable de nombreux éléments, tels le sodium, le silicium, le soufre, le chlore, le potassium, le calcium et peut être le phosphore. Le programme Finding pour sa part réussit à détecter la présence des trois pics L_α, $L\beta$ et $L\gamma$ du lanthane et du pic $K\alpha$ du strontium. La mise en évidence





ELEMENT	ppm
Na	650
Si	150
S	130
Cl	406
K	125
Ca	240
La	165
Fe	225
Sr	≈ .1

DOPANT ^{137}Cs : 500 ppm

de sodium, de potassium de chore, de calcium n'est pas surprenante puisqu'elle correspond en réalité à la présence de sels minéraux. L'équipe de Strasbourg avait signalé elle aussi la détection de soufre et de strontium. Par contre la présence de Lanthane qui semble pourtant incontestable, n'a pas été indiquée. Il faut dire que le fait d'avoir utilisé un faisceau d'ions lourds plutôt que de protons nous a permis de gagner un facteur de sensibilité appréciable.

L'étude quantitative du spectre obtenu fournit les résultats suivants:

Sodium : 650 ppm

Silicium : 150 ppm

Soufre : 130 ppm

Chlore : 400 ppm

Potassium: 125 ppm

Calcium : 240 ppm

Lanthane: 165 ppm

Strontium: inférieur à 0.1 ppm

Ces résultats sont cohérents et très vraisemblables. Une prochaine série d'expériences avec un autre faisceau doit permettre bientôt d'en vérifier la validité et la précision.

3. Etude d'un alliage

Cette expérience a été réalisée, afin de mettre en évidence les effets secondaires d'absorption et de rehaussement des raies ou effets de matrice et de démontrer l'intérêt de travailler avec des cibles minces.

L'intensité des rayons X caractéristiques d'un élément dans un composé dépend naturellement de la concentration de cet élément mais aussi de la nature des autres corps présents dans le composé: en effet si la cible est suffisamment épaisse certains photons seront absorbés, entrainant ainsi une diminution de l'intensité des raies correspondantes. Par contre, les rayons X caractéristiques d'un élément, pourront exciter dans certaines conditions, un autre élément du composé, généralement voisin dans la classification. Ce dernier se trouve ainsi excité et par le faisceau, et par les rayons X caractéristiques d'autres corps, ce qui entraine un renforcement de ses raies caractéristiques. Cet effet, pour être sensible, suppose qu'une partie importante des rayons X produits soit arrêtée dans la cible et donc que cette dernière a une épaisseur supérieure au libre parcours des photons de quelques keV (fig. 14). Un calcul complet de ces phénomènes a été effectué jusqu'au troisième ordre par Shiraiwa et Fujino (17).

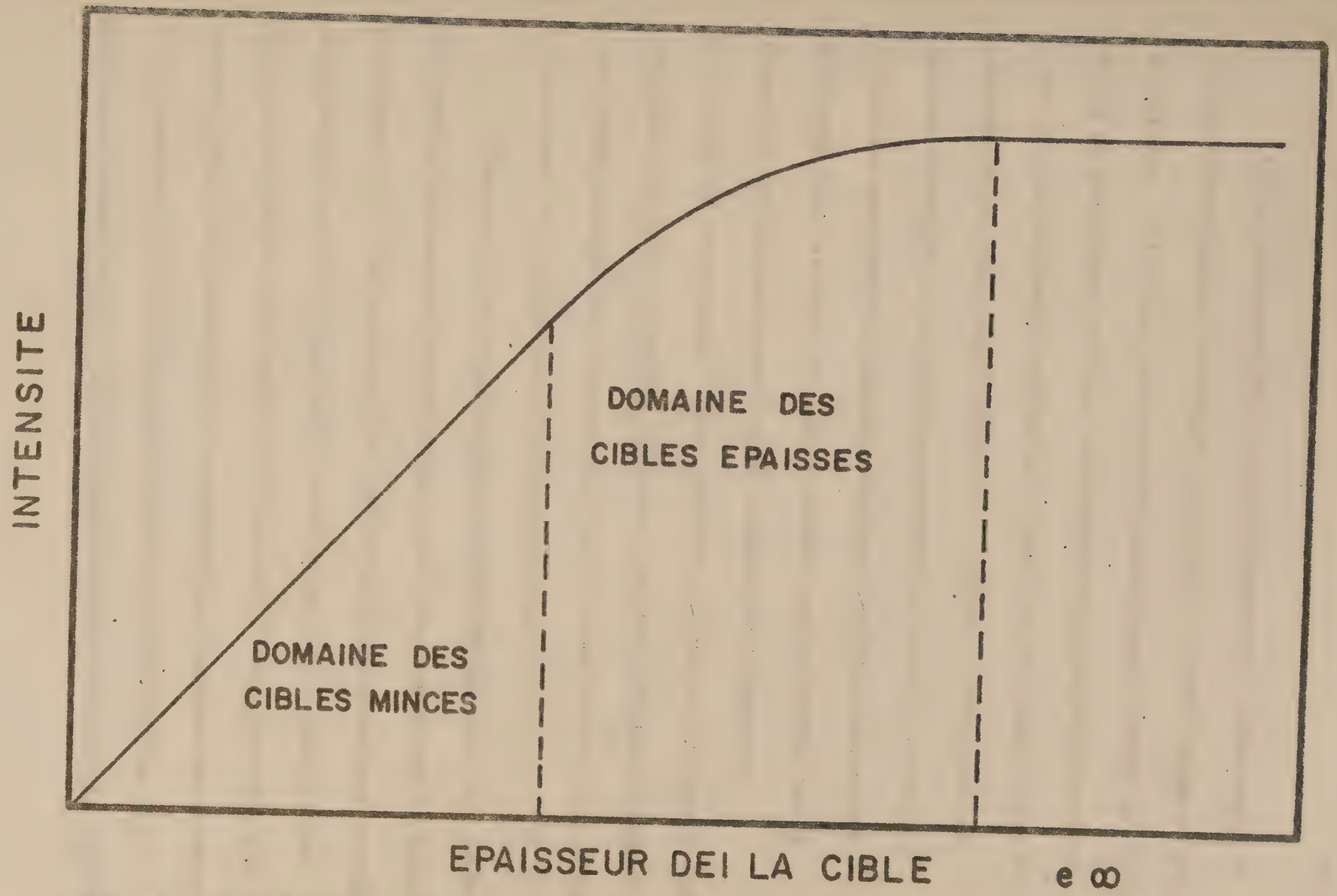
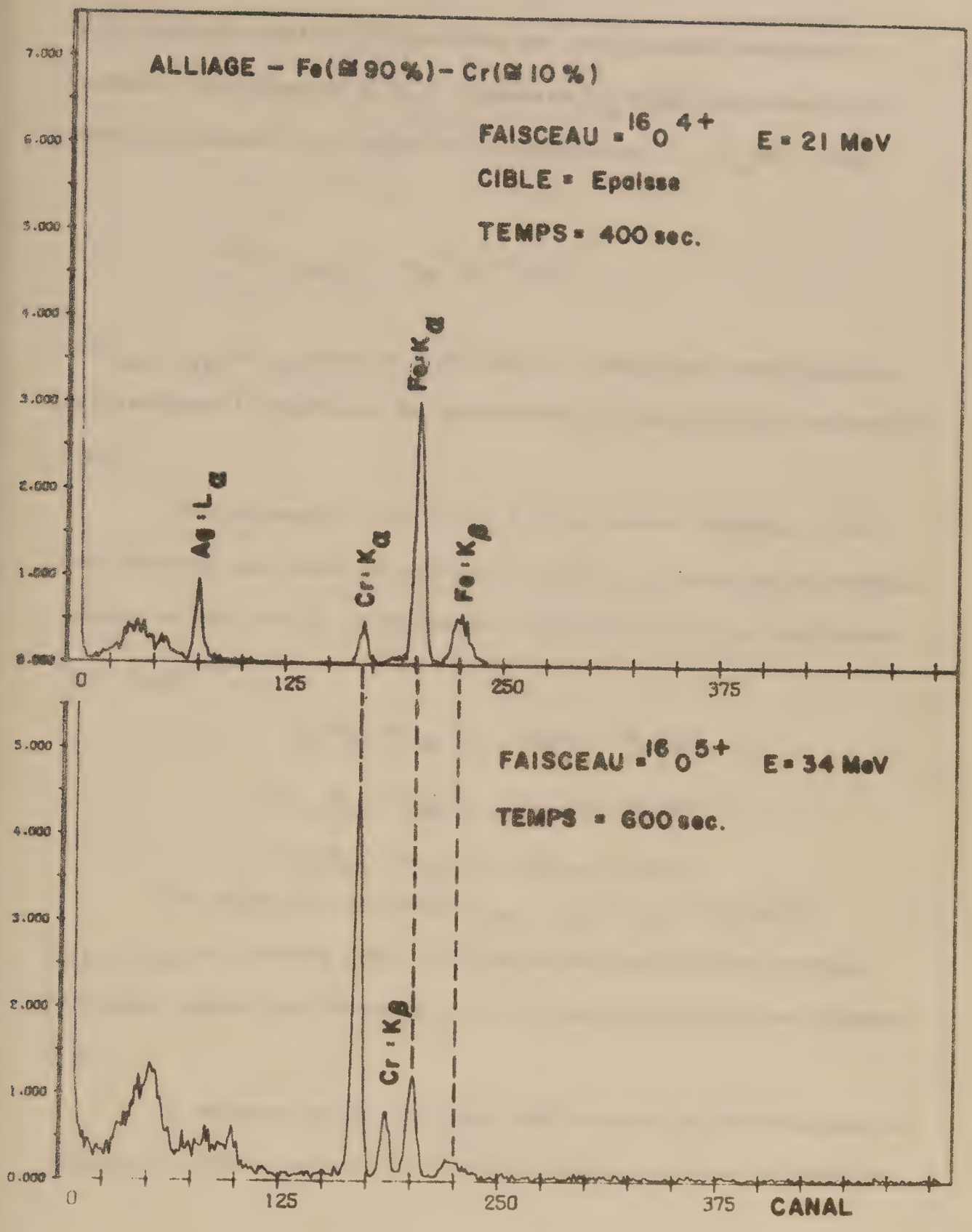


FIG. 14 VARIATION DE L'INTENSITE DES RAIES EN FONCTION DE L'EPAISSEUR DE LA CIBLE.

J'ai pu fabriquer avec l'aide du département métallurgie de l'école Polytechnique, un alliage fer-chrome contenant moins de 10% de chrome. Cet alliage a été ensuite laminé jusqu'à obtenir une épaisseur de 1/4 de millimètre environ. Deux expériences ont été effectuées; l'une avec un faisceau d'oxygène de 21 MeV, la profondeur limite de pénétration des ions étant d'environ 4.8 mg/cm^2; l'autre avec un faisceau d'oxygène de 34 MeV pourront pénétrer jusqu'à 7.4 mg/cm^2. J'espérais ainsi pouvoir mettre en évidence les effets de matrice différents dans les deux cas. Les résultats sont présentés sur la figure (15) et montrent à quel point l'influence de l'épaisseur de la cible est importante. D'une expérience à l'autre, le rapport des intensités des raies du fer et du chrome a été complètement renversé. Cette étude illustre bien l'intérêt que l'on a à travailler avec des cibles très minces, si l'on veut pouvoir négliger ces effets.

Toutefois il n'est pas toujours possible de préparer des cibles très minces de quelques microgrammes/cm^2 notamment dans le domaine métallurgique. C'est pourquoi j'ai préparé un programme pour corriger les effets de matrice lorsque celà s'avère nécessaire. Donc ce cas d'analyse est un peu plus complexe et nécessite l'étude préalable d'un certain nombre de "standards" de concentrations parfaitement connues. Le programme CONCENTB calcule en effet les concentrations des différents éléments à partir de la méthode dite des "coefficients empiriques"(18)


ALLIAGE – Fe(≅ 90 %) – Cr(≅ 10 %)
FAISCEAU = $^{16}O^{4+}$ E = 21 MeV
CIBLE = Epaisse
TEMPS = 400 sec.
Ag : L_α
Cr : K_α
Fe : K_α
Fe : K_β
7.000
6.000
5.000
4.000
3.000
2.000
1.000
0
125
250
375
FAISCEAU = $^{16}O^{5+}$ E = 34 MeV
TEMPS = 600 sec.
Cr : K_β
5.000
4.000
3.000
2.000
1.000
0.000
0
125
250
375
CANAL

Il est facile de montrer (19) que dans une cible épaisse contenant par exemple trois éléments A, B, C, l'intensité R_A d'une raie caractéristiques de l'élément A est reliée aux concentrations C_A, C_B et C_C par:

$$\frac{C_A}{R_A} = \alpha_{AA} C_A + \alpha_{AB} C_B + \alpha_{AC} C_C$$

où α_{AA}, α_{AB} et α_{AC} sont des coefficients à déterminer empiriquement, qui traduisent l'importance des phénomènes d'absorption ou de rehaussement.

Si l'on possède trois cibles 1, 2 et 3 où les éléments A, B, C sont présents avec des concentrations connues, la résolution du système linéaire suivant permet de déterminer les valeurs des trois coefficients α_{AA}, α_{AB} et α_{AC}:

$$C_{A1}/R_{A1} = \alpha_{AA} C_{A1} + \alpha_{AB} C_{B1} + \alpha_{AC} C_{C1}$$

$$C_{A2}/R_{A2} = \alpha_{AA} C_{A2} + \alpha_{AB} C_{B2} + \alpha_{AC} C_{C2}$$

$$C_{A3}/R_{A3} = \alpha_{AA} C_{A3} + \alpha_{AB} C_{B3} + \alpha_{AC} C_{C3}$$

De même les coefficients α_{BA}, α_{BB}, α_{BC} d'une part et α_{CA}, α_{CB}, α_{CC} d'autre part, s'obtiennent en résolvant des systèmes analogues relatifs aux intensités des raies caractéristiques des éléments B et C.

Il est alors facile, pour une cible inconnue où interviennent les éléments A, B, C de calculer leurs concentrations relatives en résolvant

le système:

$$(R_A\alpha_{AA}-1)\,C_A + R_A\alpha_{AB}C_B + R_A\alpha_{AC}C_C = 0$$

$$R_B\alpha_{BA}C_A + (R_B\alpha_{BB}-1)\,C_B + R_B\alpha_{BC}C_C = 0$$

$$R_C\alpha_{CA}C_A + R_C\alpha_{CB}C_B + (R_C\alpha_{CC}-1)C_C = 0$$

$$C_A + C_B + C_C = 1$$

La dernière équation est indispensable car les trois premières ne sont pas indépendantes.

Le programme CONCENTB doit être utilisé chaque fois que la cible est suffisamment épaisse pour absorber une partie appréciable des rayons X qui y sont produits. Un domaine d'application particulièrement intéressant de ce genre de traitement, serait l'étude d'alliages métalliques ou d'échantillons géologiques où il est pratiquement impossible de disposer de cibles minces.

CHAPITRE IV

PERSPECTIVES D'AVENIR

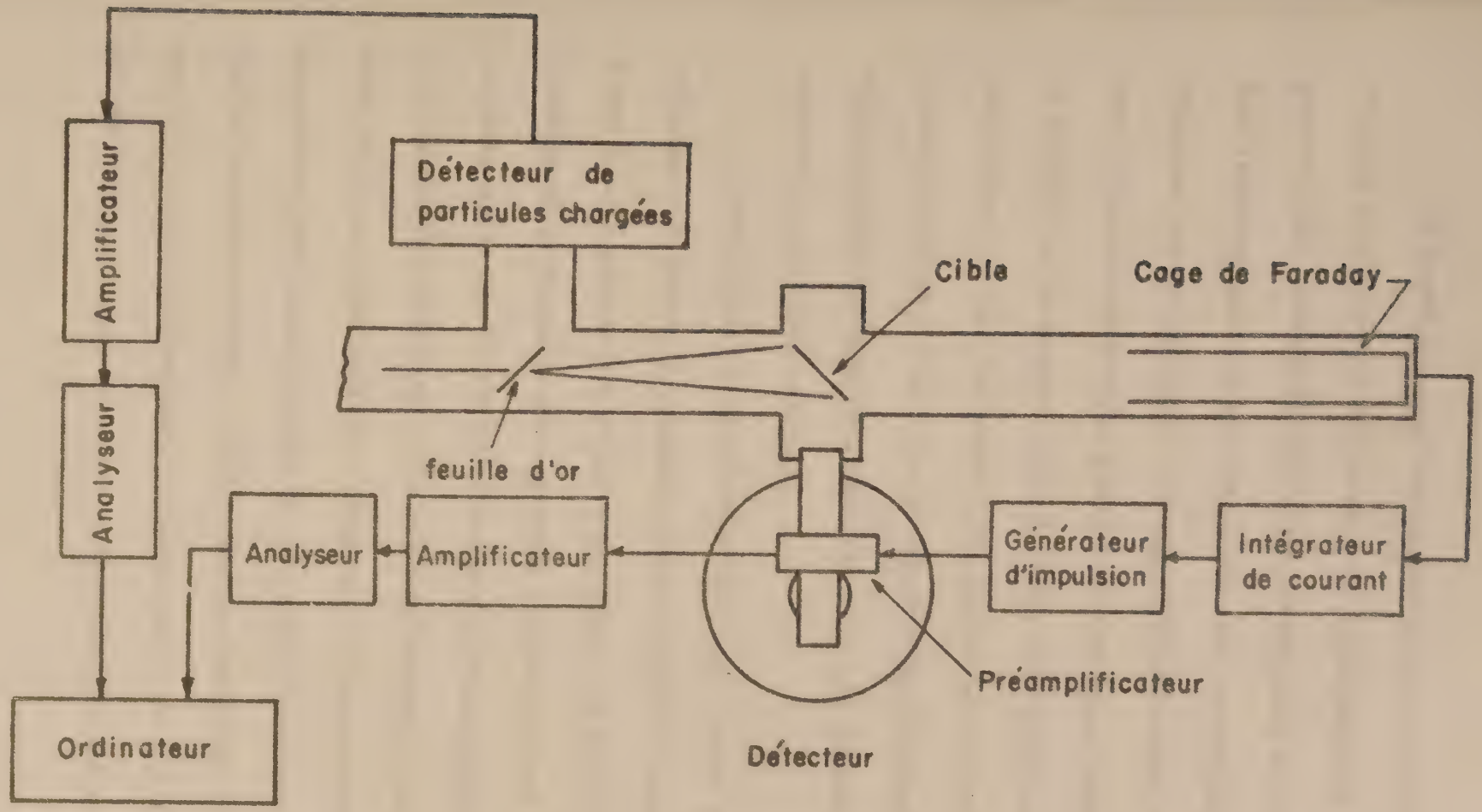
Les qualités de la méthode utilisée, ainsi que la demande de plus en plus forte dans le domaine de l'analyse de traces, nous encouragent à développer et à perfectionner notre équipement, tout en cherchant à améliorer le degré de sensibilité et de précision des mesures.

Sur le système déjà existant nous envisageons très sérieusement d'installer un détecteur de particules chargées. Comme je l'ai déjà signalé, la cage de Faraday fournit une indication très imprécise du nombre de particules ayant frappé la cible en raison notamment du "stripping" des ions du faisceau à l'intérieur de l'échantillon étudié. Or il est très important de connaître la densité du faisceau sur la cible, pour évaluer ensuite des sections efficaces absolues. Il ne faut en effet pas perdre de vue que, si le modèle de Garcia est sans doute à l'heure actuelle le moyen le plus sûr pour fournir des sections efficaces théoriques, à longue échéance un choix de sections efficaces expérimentales déterminées avec une grande précision pourra s'avérer peut être plus intéressant.

On envisage donc d'installer, avant la chambre de réaction, une mince feuille d'or à 45° par rapport à l'axe du faisceau et un détecteur de particules chargées situé à 90°. La feuille d'or

aurait le double but de permettre la détection des particules, et de défocaliser le faisceau sur la cible, permettant de s'affranchir des inhomogénéités de celle-ci.

Mais la détermination des sections efficaces implique aussi la connaissance du temps réel de l'expérience corrigée du temps mort. Ce point est particulièrement important dans notre cas où les taux de comptage sont généralement élevés. Une information sur le temps mort peut être obtenue en utilisant un intégrateur de courant branché à la sortie de la cage de Faraday. Un tel intégrateur possède en effet la propriété de fournir une impulsion dès qu'une certaine charge a été détectée. On peut donc utiliser ce signal pour déclencher un générateur d'impulsions branché à l'entrée même du préamplificateur. Les impulsions du générateur traversent ainsi toute la chaine électronique au même titre que les impulsions dues à la détection de rayons X, et sont donc affectées comme elles par le temps mort. La figure (16) donne une représentation d'un tel montage : On aurait ainsi un pic supplémentaire dans le spectre, correspondant au générateur d'impulsions, et contenant toute l'information relative aux conditions expérimentales: nombre de particules ayant frappé la cible et temps réel de l'expérience compte tenu du temps mort. Il serait ainsi possible de normaliser tous les spectres entre eux.



AMELIORATION DU MONTAGE

FIG. 16

Un autre domaine dans lequel il est prévu de travailler, est celui de la fabrication de cibles. La préparation de cibles très minces pose en effet souvent des problèmes techniques délicats qu'il nous faut résoudre dans les cas les plus divers concernant la nature et l'état physique des échantillons. L'emploi de l'atomiseur se révèle efficace pour toutes les substances pouvant être amenées facilement à l'état de solution ou de suspension colloïdale. L'utilisation de filtres millipores pourrait se révéler des plus intéressantes, pour l'analyse des liquides et des gaz, ainsi que je l'ai déjà signalé. Il nous faut par ailleurs étudier différents éléments dopants et choisir les mieux adaptés au type des expériences réalisées.

Par ailleurs le laboratoire envisage l'achat d'un nouveau détecteur, de nouveaux modules électroniques et vraisemblablement d'une source radioactive de forte puissance. Il serait en effet très intéressant de disposer d'un système complet pouvant fonctionner en permanence et de réserver l'utilisation de l'accélérateur pour les expériences les plus délicates. Le choix du détecteur n'est pas encore fixé, mais les manufacturiers proposent à l'heure actuelle des appareils sensibles à très basse énergie et permettant d'analyser les éléments légers jusqu'au carbone. Un tel détecteur se révélerait très intéressant pour des analyses en métallurgie notamment, où l'on connaît l'importance du rôle joué par l'oxygène ou le carbone dans les métaux. On prévoit

aussi d'acheter un amplificateur de bonne qualité, comprenant notamment un système de "pile up rejection" intégré. On pourrait ainsi disposer d'un ensemble électronique complet monté à demeure.

Sur le plan expérimental enfin, il est prévu de vérifier à courte échéance la validité de toutes les considérations théoriques développées dans la première partie. Il est en effet indispensable de préciser un domaine d'application du modèle proposé qui soit compatible avec la précision exigée. Celà nécessite de faire plusieurs études, avec des cibles étalons comprenant plusieurs éléments bien répartis dans la classification périodique et en quantités parfaitement définies; ces mesures seront effectuées avec des faisceaux de nature différente et dans une gamme d'énergie la plus étendue possible. Dans un premier temps, nous allons étudier l'influence de la variation des rapports d'intensité K_α/K_β sur la qualité des dosages. J'ai déjà signalé en effet que l'ionisation plus ou moins importante des couches extérieures de l'atome pouvait diminuer l'intensité de la raie K_β, surtout avec l'emploi d'ions lourds comme projectiles. On risque donc de sous évaluer d'autant plus la proportion d'un élément dans une cible que cet effet est plus important. L'utilisation d'un dopant dont les raies seraient elles aussi affectées par cette diminution peut permettre de diminuer l'erreur ainsi commise sur les dosages. Mais il est fort probable que les éléments légers et les éléments lourds soient concernés différemment

par cet effet; les éléments légers, pour lesquels les énergies de liaison sont beaucoup plus faibles, perdent en effet plus facilement leurs électrons que les éléments lourds, et leurs concentrations dans les cibles risquent d'être systématiquement sous-évaluées. Or ce phénomène a été jusqu'ici fort peu étudié et aucune précision n'a été fournie sur l'influence de l'énergie et de la nature du faisceau. Il est donc prévu de fabriquer une cible contenant deux dopants, l'un léger et l'autre lourd, en quantités connues, et de l'irradier avec différentes particules à des énergies variables. L'étude de la variation de l'importance relative des raies caractéristiques de l'un et l'autre éléments, devait fournir des indications intéressantes sur la nature du phénomène, et sur son importance dans les dosages.

CONCLUSION

En une année d'expérience, et malgré le nombre relativement réduit d'études effectuées jusqu'ici, nous avons acquis la conviction que la méthode d'analyse de traces d'éléments par excitation de rayons X caractéristiques au moyen de particules chargées, est extrêmement sensible et certainement promise à un grand développement. Cette année a été essentiellement consacrée à l'optimisation des conditions expérimentales et à la conception et la réalisation d'un système souple et très automatisé de calcul et de traitement des données. Il nous a en effet paru indispensable de ne pas négliger cette étape de mise au point avant d'entreprendre une campagne d'analyses. Il reste maintenant à définir avec précision les domaines expérimentaux qui permettront d'une part de minimiser les erreurs commises dans l'évaluation des concentrations, et d'autre part de travailler dans les meilleures conditions d'efficacité.

Les premiers résultats obtenus nous ont montré l'extraordinaire sensibilité de la méthode. Certains auteurs (20) signalent avoir détecté sans aucune difficulté jusqu'à 1 nanogramme de Zinc tout en ayant un pic suffisamment important pour faire un dosage quantitatif valable. Une telle sensibilité rend de procédé d'analyse très intéressant dans le domaine de l'écologie ou de la biologie. On prend en effet de plus en

plus conscience que certaines maladies sont liées à des variations dans les quantités de certains métaux qui viennent se fixer sur les chaines de protéines. C'est ainsi que certains cancerssont associés à une augmentation du taux de cuivre de magnésium de manganèse et de zinc dans les cellules. Nous nous proposons d'ailleurs bientôt d'analyser un certain nombre de tissus cancéreux fournis par un laboratoire de cancérologie de New York.

Ainsi la recherche de traces d'éléments est appelée à se développer continuellement et dans un nombre croissant de domaines; et il semble bien que les moyens puissants de la physique nucléaire aient permi de mettre au point une technique d'analyse qui,lorsqu'elle sera parfaitement maitrisée sera, nous n'en doutons point, l'une des plus performantes.

REMERCIEMENTS

Je désire remercier tout particulièrement Dr. Pierre Depommier pour l'accueil qu'il m'a réservé au Laboratoire de Physique Nucléaire de l'Université de Montréal et les facilités qu'il m'a accordées pour mener à bien mon travail.

Ma plus vive reconnaissance va à tous les membres du groupe d'études sur les rayons X et surtout à Claude Cardinal dont l'esprit d'équipe a contribué efficacement à la réalisation de mon projet.

Je dois mentionner tout particulièrement le nom de Jean-Pierre Martin qui, avec beaucoup de patience m'a fait profiter de son excellente connaissance de l'ordinateur du laboratoire et des problèmes de programmation.

Je remercie enfin toute l'équipe technique du laboratoire, ainsi que Madame Blanchet dont le mérite est d'avoir déchiffré mon mamuscrit et de l'avoir rendu présentable.

Tables des Hors-textes

Figure 1 - Nombre Atomique, Z - Sensibilité à la détection des traces d'éléments -

Figure 2 - Energie des protons (keV) -

Figure 3 - $E/\lambda u_K$ -

Figure 4 - Comparaison des résultats de Born et de Garcia -

Figure 5 - Concentration en partie par millions -

Figure 6 - Résultats expérimentaux obtenues avec des ions lourds -

Figure 7 - Plan de la ligne -

Figure 8 - Porte-cibles -

Figure 9 - Efficacité du détecteur -

Figure 10 - Contributions de l'électronique et du détecteur à la résolution -

Figure 11 - Différents types de contre-réactions -

Figure 12 - Anneau de garde double -

Figure 13 - Spectres d'une eau minérale -

Figure 14 - Variation de l'intensité des raies en fonction de l'épaisseur de la cible -

Figure 15 - Spectres d'un alliage fer-chrome -

Figure 16 - Amélioration du montage -

BIBLIOGRAPHIE

1. MERZBACHER, E. et LEWIS, H. 1958. Handbuch der physik (Springer verlag, Berlin), 34, 166.
2. GARCIA, J.D. 1970 a. Phys. Rev. A, 1, 280.
   1970 b. Phys. Rev. A, 1, 1402.
3. GARCIA, J.D. 1971. Phys. Rev. A, 4, 955.
4. BANG, J. and HANSTEEN, J.M. 1959. KGL. Danske vinenskab selskab, Mat. Fys. Medd., 37, No.13.
5. GARCIA PREPRINT.
6. MOTT, N.F. et MASSEY, H.S.W.:"The theory of atomic collisions", third edition - 1965 - Cahp. XII.
7. GERJVOY, E., Phys. Rev. 148,54 (1966).
8. VRIENS, L. 1969: Case studies in atomic collision physics, eds. Daniel and Dowell (North-Holland Pub. Co. Amsterdam).
9. FANO, V. et LICHTEN W., Phys. Rev. Letts. 14, 627 (1965).
10. JOLLY, R.K. et WHITE, H.B. Jr., Nucl. Inst. and Methods 97 (1971), 103-105.
11. WENTZEL, G. Physik 43, 524 (1927).
12. KOSTROUN, V.O., CHEN, M.H. et CRASEMANN, B., Phys. Rev. A, Vol. 3, No 2 (1971), 533.

13. MEHLHORN, W., STALHERM, D. 1968. 217, 294.

14. GOULDING, F.S. and STONE, Y., University of California Research Laboratories Report UCRL - 19860 (1970).

15. MARISCOTTI, M.A - Nucl. Inst. and Methods 50 (1967) 309-320.

16. PAPE, A. SENS, J.C., FINTZ, D., GALLMANN, A., Gove, H.E., GUILLAUME, G. and STUPIN, D.M., Nucl. Inst. and Methods, 105 (1972) 161-162.

17. TOSHIO SHIRAIWA and NOBUKATSU FUJINO: Japonese Journal of Applied Physics. Vol. 5, No 10, Octobre 1966.

18. CRISS, J.W. and BIRKS, L.S., Anal. Chem. vol. 40 No 7, juin 1968, 1080.

19. BERTIN, P., 'Principles and practice of X-Ray Spectrometric Analysis",

20. JOHANSON, J.B., AKSELSSON, R. and JOHANSSON, S.A.E., Nucl. Inst. and Meth. 84, 141 (1970).

21. LECOQ, P., Programmes d'analyse de données dans les expériences de rayons X - Rapport interne.

APPENDICE

LISTE DES PROGRAMMES

```
00000          PROGRAM RX
00001          COMMON A(100),TAB(100,2),ALPHAK(100),BETAK(100)
00001          COMMON ALPHAL(100),BETA1L(100),BETA2L(100),GAMMAL(100)
00001          INTEGER TAB
00001          IF(L)33,10,33
00004       10 L=1
00006          READ(1,15)(ALPHAL(I),I=1,100)
00031          READ(1,15)(BETA1L(I),I=1,100)
00054          READ(1,15)(BETA2L(I),I=1,100)
00077          READ(1,15)(GAMMAL(I),I=1,100)
00122          READ(1,15)(ALPHAK(I),I=1,100)
00145          READ(1,15)(BETAK(I),I=1,100)
00170          READ(1,15)(A(I),I=1,100)
00213       15 FORMAT(10F8.4)
00216          READ(1,23)(TAB(I,1),I=1,100)
00237       23 FORMAT(26R3)
00242          READ(1,24)(TAB(I,2),I=1,100)
00263       24 FORMAT(26I3)
00266          I=1
00270       32 IF(TAB(I,1)-TAB(I+1,1))26,26,22
00276       22 J=TAB(I,1)
00301          K=TAB(I,2)
00304       30 TAB(I,1)=TAB(I+1,1)
00307          TAB(I,2)=TAB(I+1,2)
00312          I=I+1
00315          IF(J-TAB(I+1,1))31,31,30
00323       31 TAB(I,1)=J
00326          TAB(I,2)=K
00331       26 I=I+1
00334          IF(I-100)32,33,33
00341       33 CONTINUE
00341          REWIND 1
00343          GO TO 50
00344          CALL MARK
00345       50 CONTINUE
00345          CALL MIMI
00346          END

UBPROGRAMS
 BCDIO      BCDIOEND   FREWIND    MARK       MIMI

ROGRAM ALLOCATION

00354    RX         00356    L          00357    I          00360    J
00361    K


OMMON ALLOCATION

00000    A          00310    TAB        00620    ALPHAK     01130    BETAK
01440    ALPHAL     01750    BETA1L     02260    BETA2L     02570    GAMMAL
```

				574	638	705	775	849	926	1.01	
1.098	1.189	1.282	1.379	1.48	1.585	1.695	1.807	1.923	2.043		
2.166	2.293	2.424	2.558	2.697	2.839	2.984	3.133	3.287	3.444		
3.604	3.769	3.938	4.11	4.286	4.467	4.652	4.84	5.033	5.23		
5.422	5.638	5.846	6.058	6.274	6.495	6.721	6.949	7.18	7.415		
7.654	7.898	8.145	8.395	8.651	8.911	9.175	9.442	9.713	9.988		
10.267	10.551	10.839	11.131	11.427	11.727	12.03	12.337	12.651	12.968		
13.291	13.618	13.949	14.285	14.625	14.97	15.32	15.675	16.036	16.403		
				583	649	718	79	866	945	1.033	
1.125	1.22	1.318	1.42	1.525	1.636	1.751	1.872	1.997	2.125		
2.258	2.395	2.537	2.683	2.834	2.99	3.151	3.317	3.487	3.663		
3.844	4.029	4.219	4.416	4.62	4.829	5.043	5.263	5.489	5.721		
5.961	6.206	6.457	6.713	6.978	7.248	7.526	7.811	8.102	8.401		
8.708	9.023	9.343	9.67	10.007	10.354	10.708	11.071	11.443	11.824		
12.212	12.614	13.025	13.446	13.876	14.315	14.768	15.231	15.721	16.203		
16.705	17.22	17.75	18.297	18.858	19.433	20.021	20.623	21.239	21.869		
				2.837	3.002	3.171	3.346	3.528	3.714	3.905	
4.101	4.301	4.507	4.719	4.933	5.155	5.385	5.618	5.852	6.091		
6.377	6.589	6.843	7.103	7.367	7.636	7.911	8.189	8.471	8.755		
9.046	9.347	9.652	9.962	10.276	10.597	10.922	11.251	11.585	11.923		
12.27	12.622	12.98	13.341	13.708	14.078	14.454	14.836	15.226	15.624		
16.025	16.43	16.841	17.262	17.691	18.129	18.575	19.027	19.487	19.955		
				2.966	3.144	3.327	3.519	3.718	3.922	4.132	
4.35	4.572	4.802	5.039	5.281	5.531	5.792	6.059	6.328	6.605		
6.891	7.185	7.484	7.790	8.104	8.424	8.753	9.088	9.43	9.78		
10.139	10.515	10.896	11.285	11.684	12.094	12.513	12.942	13.381	13.829		
14.29	14.765	15.25	15.746	16.252	16.769	17.301	17.846	18.408	18.98		
19.568	20.168	20.784	21.421	22.077	22.751	23.442	24.152	24.882	25.632		
		.054	.109	.184	.279	.393	.524	.675	.849		
1.041	1.255	1.487	1.739	2.014	2.307	2.622	2.958	3.313	3.691		
4.090	4.510	4.952	5.414	5.899	6.404	6.930	7.478	8.048	8.639		
9.252	9.887	10.544	11.224	11.923	12.648	13.395	14.165	14.959	15.775		
16.616	17.479	18.367	19.279	20.216	21.176	22.163	23.174	24.210	25.271		
26.359	27.473	28.613	29.779	30.973	32.194	33.441	34.720	36.027	37.361		
38.725	40.118	41.542	42.996	44.482	45.998	47.546	49.128	50.742	52.389		
54.071	55.785	57.536	59.321	61.142	63.000	64.896	66.831	68.806	70.813		
72.874	74.969	77.106	79.291	81.516	83.785	86.107	88.476	90.889	93.351		
95.868	98.436	101.057	103.734	106.471	109.271	112.133	115.076	118.088	121.178		

				1.838	2.142	2.468	2.817	3.191	3.589	4.012	
4.459	4.931	5.427	5.947	6.492	7.059	7.649	8.265	8.907	9.572		
10.264	10.983	11.727	12.497	13.290	14.113	14.961	15.836	16.739	17.668		
18.625	19.608	20.618	21.656	22.724	23.818	24.943	26.095	27.276	28.486		
29.725	30.995	32.294	33.625	34.987	36.380	37.801	39.258	40.749	42.271		
43.827	45.415	47.038	48.695	50.386	52.112	53.875	55.674	57.509	59.382		
61.292	63.237	65.222	67.244	69.308	71.414	73.560	75.750	77.982	80.255		
82.574	84.936	87.349	89.810	92.314	94.866	97.473	100.131	102.841	105.605		
108.427	111.302	114.235	117.229	120.287	123.414	126.613	129.888	133.243	136.682		
1.	3.97	6.88	8.94	10.72	11.92	13.90	15.87	18.85	20.01		
22.81	24.11	26.77	27.86	30.73	31.81	35.17	39.63	38.79	39.76		
44.60	47.52	50.54	51.58	54.50	55.40	58.47	58.24	63.04	64.85		
69.17	72.01	74.33	78.33	79.27	83.13	84.79	86.92	98.20	90.50		
92.17	95.18	93.12	100.27	102.09	105.56	107.01	111.51	113.91	117.75		
120.78	126.59	125.90	130.26	131.65	136.25	137.80	139.01	139.79	143.10		
143.85	149.21	150.75	156.00	157.66	161.21	163.62	165.93	167.59	171.67		
173.58	177.07	179.51	182.39	184.72	188.69	190.69	193.54	195.40	199.00		
202.75	205.56	207.32	207.34	208.33	220.23	221.23	224.21	225.20	230.20		
229.20	236.14	235.17	242.06	241.07	245.04	245.04	249.01	251.98	254.96		
AC	AG	AL	AM	AR	AS	AT	AU	B	BA	BE	BI	BK	BR	C	CA	CD	CE	CF	CL	CM	CO	CR	CS	CU	DY
ER	ES	EU	F	FE	FM	FR	GA	GD	GE	H	HE	HF	HG	HO	I	IN	IR	K	KR	LA	LI	LU	MG	MN	MO
N	NA	NB	ND	NE	NI	NP	O	OS	P	PA	PB	PD	PM	PO	PR	PT	PU	RA	RB	RE	RH	RN	RU	S	SB
SC	SE	SI	SM	SN	SR	TA	TB	TC	TE	TH	TI	TL	TM	U	V	W	XE	Y	YB	ZN	ZR				
89	47	13	95	18	33	85	79	5	56	4	83	97	35	6	20	48	53	98	17	96	27	24	55	29	66
68	99	63	9	26	100	87	31	64	32	1	2	72	80	67	53	49	77	19	36	57	3	71	12	25	42
7	11	41	60	10	28	93	8	76	15	91	82	46	61	84	59	78	94	88	37	75	45	86	44	16	51
21	24	14	62	50	38	73	65	43	52	90	22	81	69	92	23	74	54	39	70	30	40				

```
00000         SUBROUTINE MARK
00001         DEFINED N
00004         DIMENSION N(1)
00004         DEFINED IDEF
00007         DIMENSION IDEF(1)
00007         DIMENSION M(100)
00007         COMMON A(100),TAB(100,2),ALPHAK(100),BETAK(100),
00007         COMMON ALPHAL(100),BETA1L(100),BETA2L(100),GAMMAL(100)
00007         INTEGER TAB
00007     199 WRITE(11,200)
00013     200 FORMAT(/*ELEMENT*)
00017         READ(10,201)KL
00025     201 FORMAT(R3)
00027         IAXY1=40006000B
00031         IAXY2=40002000B
00033         IF(KL-3R   )211,210,211
00037     211 CALL DICTAB(KL,100,L)
00043         ID=60+2*IDEF(60)
00052         JD=50+2*IDEF(60)
00061         WRITE(11,1000)
00065    1000 FORMAT(*RAIES K(K) OU RAIES L(L)*)
00075         READ(10,201)KM
00103         IF(KM-3RK  )1204,204,1204
00107     204 NA=(ALPHAK(L)-(IDEF(ID)/1000.))/(IDEF(JD)/(1000.*8192.))
00141         NB=(BETAK(L)-(IDEF(ID)/1000.))/(IDEF(JD)/(1000.*8192))
00173         NNA=2*NA
00176         M(1)=LSHIFT(NNA,12)
00202         M(1)=LOR(M(1),64)
00210         M(1)=LOR(M(1),IAXY1)
00215         NNB=2*NB
00221         M(2)=LSHIFT(NNB,12)
00225         M(2)=LOR(M(2),64)
00233         M(2)=LOR(M(2),IAXY2)
00241         DO 400 K=1,100
00244         IF(TAB(K,2)-L)400,401,400
00251     400 CONTINUE
00256     401 IL=TAB(K,1)
00261         K1=LSHIFT(IL,-12)
00267         K1=LAND(K1,77B)
00273         IL=TAB(K,1)
00276         K2=LSHIFT(IL,-6)
00304         K2=LAND(K2,77B)
00310         CALL CG(K1,320,960,28,1,M(3),NPACKED)
00322         J1=3+NPACKED
00325         CALL CG(K2,355,960,28,1,M(J1),NPACKED)
00340         J2=J1+NPACKED-1
00344         CALL DISPLAY(N(1),512,LX,LLX,M(1),J2)
00362         IF(SENSE SWITCH 2)202,203
00364     203 IF(SENSE SWITCH 3)205,206
00366     202 L=L+1
00371         GO TO 204
00372     205 L=L-1
00375         GO TO 204
00376     206 CONTINUE
00376         GO TO 199
00377    1204 MA=(ALPHAL(L)-(IDEF(ID)/1000.))/(IDEF(JD)/(1000.*8192.))
00431         MB=(GAMMAL(L)-(IDEF(ID)/1000.))/(IDEF(JD)/(1000.*8192.))
00463         MC=(BETA1L(L)-(IDEF(ID)/1000.))/(IDEF(JD)/(1000.*8192 ))
00515         MMA=2*MA
00520         M(1)=LSHIFT(MMA,12)
00524         M(1)=LOR(M(1),64)
00532         M(1)=LOR(M(1),IAXY1)
00540         MMB=2*MB
00543         M(2)=LSHIFT(MMB,12)
00547         M(2)=LOR(M(2),64)
```

```
00555         M(2)=LOR(M(2),IAXY1)
00563         MMC=2*MC
00566         M(3)=LSHIFT(MMC,12)
00572         M(3)=LOR(M(3),64)
00600         M(3)=LOR(M(3),IAXY1)
00606         DO 1400 K=1,100
00611         IF(TAB(K,2)-L)1400,1401,1400
00616    1400 CONTINUE
00623    1401 IL=TAB(K,1)
00626         K1=LSHIFT(IL,-12)
00634         K1=LAND(K1,77B)
00640         IL=TAB(K,1)
00643         K2=LSHIFT(IL,-6)
00651         K2=LAND(K2,77B)
00655         CALL CQ(K1,320,960,28,1,M(4),NPACKED)
00667         J1=4+NPACKED
00672         CALL CQ(K2,355,960,28,1,M(J1),NPACKED)
00705         J2=J1+NPACKED
00710         CALL DISPEC(N(1),512,LX,LLX,M(1),J2)
00726         IF(SENSE SWITCH 2)1202,1203
00730    1203 IF(SENSE SWITCH 3)1205,1206
00732    1202 L=L+1
00735         GO TO 1204
00736    1205 L=L-1
00741         GO TO 1204
00742    1206 CONTINUE
00742         GO TO 199
00743         RETURN
00745     210 MM=512
00747     220 M(1)=LSHIFT(MM,12)
00753         M(1)=LOR(M(1),64)
00761         M(1)=LOR(M(1),IAXY1)
00767     280 CALL DISPEC(N(1),512,LX,LLX,M(1),1)
01005         IF(SENSE SWITCH 2)212,213
01007     212 IF(SENSE SWITCH 3)214,215
01011     214 MM=MM+2
01014         GO TO 220
01015     215 MM=MM+20
01020         GO TO 220
01021     213 IF(SENSE SWITCH 3)216,217
01023     216 MM=MM-20
01026         GO TO 220
01027     217 WRITE(11,295)
01033     295 FORMAT(+NUMERO DU PIC*)
01041         READ(10,271)NU
01047     271 FORMAT(I2)
01051         DO 290 I=1,200
01054         II=99+I
01057         IDEF(II)=3R
01065     290 CONTINUE
01072         IF(NU-00)272,273,272
01076     272 E=(IDEF(ID)+(IDEF(JD)*FLOAT(MM/2)/8192.))/1000.
01126         WRITE(11,505)E
01134     505 FORMAT(F10.4)
01137         E1=E+.05
01142         E2=E-.05
01145         L1=0
01147         L2=0
01151         L3=0
01153         L4=0
01155         L5=0
01157         L6=0
01161         DO 240 LL=1,100
01164         IF(ALPHAK(LL)-E1)221,222,223
01174     221 IF(ALPHAK(LL)-E2)223,222,222
```

```
01204     223 GO TO 230
01305     222 L1=L1+1
01210         LL1=94+6*L1
01214         DO 500 ML=1,100
01217         IF(TAB(ML,2)-LL)500,501,500
01224     500 CONTINUE
01231     501 IDEF(LL1)=TAB(ML,1)
01240     230 IF(BETAK(LL)-E1)231,232,233
01250     231 IF(BETAK(LL)-E2)233,232,232
01260     233 GO TO 1230
01261     232 L2=L2+1
01264         LL2=95+6*L2
01270         DO 600 MN=1,100
01273         IF(TAB(MN,2)-LL)600,601,600
01300     600 CONTINUE
01305     601 IDEF(LL2)=TAB(MN,1)
01314    1230 IF(ALPHAL(LL)-E1)1221,1222,1223
01324    1221 IF(ALPHAL(LL)-E2)1223,1222,1222
01334    1223 GO TO 1240
01335    1222 L3=L3+1
01340         LL3=96+6*L3
01344         DO 1500 NL=1,100
01347         IF(TAB(NL,2)-LL)1500,1501,1500
01354    1500 CONTINUE
01361    1501 IDEF(LL3)=TAB(NL,1)
01370    1240 IF(BETA1L(LL)-E1)2221,2222,2223
01400    2221 IF(BETA1L(LL)-E2)2223,2222,2222
01410    2223 GO TO 1250
01411    2222 L4=L4+1
01414         LL4=97+6*L4
01420         DO 2500 NL1=1,100
01423         IF(TAB(NL1,2)-LL)2500,2501,2500
01430    2500 CONTINUE
01435    2501 IDEF(LL4)=TAB(NL1,1)
01444    1250 IF(BETA2L(LL)-E1)3221,3222,3223
01454    3221 IF(BETA2L(LL)-E2)3223,3222,3222
01464    3223 GO TO 1260
01465    3222 L5=L5+1
01470         LL5=98+6*L5
01474         DO 3500 NL2=1,100
01477         IF(TAB(NL2,2)-LL)3500,3501,3500
01504    3500 CONTINUE
01511    3501 IDEF(LL5)=TAB(NL2,1)
01520    1260 IF(GAMMAL(LL)-E1)4221,4222,4223
01530    4221 IF(GAMMAL(LL)-E2)4223,4222,4222
01540    4223 GO TO 240
01541    4222 L6=L6+1
01544         LL6=99+6*L6
01550         DO 4500 NL3=1,100
01553         IF(TAB(NL3,2)-LL)4500,4501,4500
01560    4500 CONTINUE
01565    4501 IDEF(LL6)=TAB(NL3,1)
01574     240 CONTINUE
01601         NC=MM/2
01604         WRITE(13,250)NU,NC,E
01616     250 FORMAT(/////10X,*NUMERO DU PIC=*,I2,5X,*CANAL=*,I3,5X,
01615        2*ENERGIE=*,F10.4)
01643         WRITE(13,251)
01647     251 FORMAT(///5X,*KALPHA*,5X,*KBETA*,5X,*LALPHA*,5X,*LBETA 1*,5X,
01647        2*LBETA 2*,5X,*LGAMMA*)
01673         DO 4600 I=1,3
01700         II1=94+6*I
01704         II2=95+6*I
01710         II3=96+6*I
01714         II4=97+6*I
```

```
01720          II5=98+6*I
01724          II6=99+6*I
01730         WRITE(13,255)IDEF(II1),IDEF(II2),IDEF(II3),IDEF(II4),
01730        2IDEF(II5),IDEF(II6)
02014      255 FORMAT(/5X,R3,8X,R3,7X,R3,8X,R3,9X,R3,9X,R3)
02027     4000 CONTINUE
02024      270 CONTINUE
02034          GO TO 280
02035      273 CONTINUE
02037          RETURN
02037          END

UBPROGRAMS

 CHKDEFIN    BCDIO       BCDIOEND    DICTAB      Q80FLOAT    FIXFLOAT
 LSHIFT      LOR         LAND        CG          DISPEC      FLOAT

ROGRAM ALLOCATION

02123      MARK        02123      KL          02124      IAXY1       02125      IAXY2
02126      L           02127      ID          02130      JD          02131      KM
02132      NA          02133      NB          02134      NNA         02135      NNB
02136      K           02137      IL          02140      K1          02141      K2
02142      NPACKED     02143      J1          02144      J2          02145      LX
02146      LLX         02147      MA          02150      MB          02151      MC
02152      MMA         02153      MMB         02154      MMC         02155      MM
02156      NU          02157      I           02160      II          02161      E
02162      E1          02165      E2          02167      L1          02170      L2
02171      L3          02172      L4          02173      L5          02174      L6
02175      LL          02176      LL1         02177      ML          02200      LL2
02201      MN          02202      LL3         02203      NL          02204      LL4
02205      NL1         02206      LL5         02207      NL2         02210      LL6
02211      NL3         02212      NC          02213      II1         02214      II2
02215      II3         02216      II4         02217      II5         02220      II6

02221      M

ONMON ALLOCATION

00000      A           00310      TAB         00620      ALPHAK      01130      BETAK
01440      ALPHAL      01750      BETA1L      02260      BETA2L      02570      GAMMAL
```

```
00000          SUBROUTINE DICTAB(ELEM,N,RESUL)
00010          COMMON A(100),TAB(100,2),ALPHAK(100),BETAK(100)
00010          COMMON ALPHAL(100),BETA1L(100),BETA2L(100),GAMMAL(100)
00010          INTEGER ELEM,RESUL
00010          INTEGER TAB
00010          I=1
00012          J=N
00014       10 IF(I-J)90,100,150
00021       90 K=(I+J)/2
00025          IF(TAB(K,1)-ELEM)60,120,50
00033       60 I=K+1
00036          GO TO 10
00037       50 J=K-1
00042          GO TO 10
00043      100 IF(TAB(I,1)-ELEM)150,110,150
00050      110 K=I
00052      120 RESUL=TAB(K,2)
00055          RETURN
00057      150 WRITE(11,200)
00063      200 FORMAT(//*          ELEMENT NON EXISTANT*)
00075          END
```

UBPROGRAMS

 BCDIO   BCDIOEND

ROGRAM ALLOCATION

```
00106    DICTAB    00110    I         00111    J         00112    K
```

ONMON ALLOCATION

```
00000    A         00310    TAB       00620    ALPHAK    01130    BETAK
01440    ALPHAL    01750    BETA1L    02260    BETA2L    02570    GAMMAL
```

```
00000        SUBROUTINE CAL
00001  C     VERSION MAI 1973
00001        DEFINED IDEF
00004        DIMENSION IDEF(1)
00004        DEFINED N
00007        DIMENSION N(1)
00007        DIMENSION IEN(20),ICAN(20)
00007        INTEGER OUT
00007        IN=10
00011        OUT=11
00013        DO 1 I=1,20
00016        IEN(I)=0
00021        ICAN(I)=0
00024      1 CONTINUE
00021        J=1
00033        IREG=IDEF(60).
00040        I=IDEF(IREG+16)
00046        NCHAN=IDEF(IREG+2)
00054  C     AFFICHER LE SPECTRE POUR POINTER LES POINTS DE CALIBRATION
00054     10 CALL DISPEC(N(I),NCHAN,L,LL)
00067  C.    IL FAUT AU MOINS DEUX POINTS
00067        IF(J-2)20,20,11
00074  C     POUR TERMINER ON SORT AVEC LA MEME VALEUR QUE LE POINT PRECEDENT
00074     11 J1=J-1
00077        IF(ICAN(J1)-L)20,100, 20
00104     20 ICAN(J)=L
00107     21 WRITE(OUT,1000)ICAN(J)
00120   1000 FORMAT(/* CANAL*,I5,*...E=*)
00127        READ(IN,1001)E
00135        JE=E
00140        DEL=E-FLOAT(JE)-0.000001
00147  C     VERIFIER SI E A ETE ENTRE EN POINT FIXE
00147        IF(DEL)30,30,22
00153     22 WRITE(OUT,1002)
00167   1002 FORMAT(//* ECRIVEZ L"ENERGIE EN FORMAT I,    EN KEV OU EN EV*)
00176        GO TO  21
00177   1001 FORMAT(F10.0)
00202     30 IEN(J)=JE
00205        J=J+1
00210        IF(J-20)10,10,100
00215  C     CALCUL DE M ET B PAR MOINDRE CARRE
00215    100 J=J-1
00220        SX=0
00223        SY=0.
00225        SXY=0.
00227        SX2=0.
00231        DO 110 I=1,J
00234        EN=IEN(I)
00240        CAN=ICAN(I)
00244        SX2=SX2+CAN*CAN
00250        SXY=SXY+CAN*EN
00254        SX=SX+CAN
00257        SY=SY+EN
00262    110 CONTINUE
00267        FM=(J*SXY-SX*SY)/(J*SX2-SX*SX)
00310        B=(SXY*SX-SY*SX2)/(SX*SX-J*SX2)
00330        K=2*IREG+59
00324  C     ON MULTIPLIE PAR 2**13 POUR PERMETTRE UN CALCUL EN POINT FIXE
00334  C     AVEC UNE PRECISION SUFFISANTE=(DANS LE PROGRAMME DISPEC).
00334        FM=FM*8192.  +0.5
00340        B=B+0.5
00343        IDEF(K)=FM
00352        IDEF(K+1)=B
00361        RETURN
00363        END


UDFROGRAMS

 CHKDEFIN   DISPEC     BCDIO      BCDIOEND   FIXFLOAT   FLOAT
 FLOATFIX   Q80FLOAT

ROGRAM ALLOCATION

00420    CAL        00422    IN         00423    OUT        00424    I
00425    J          00426    IREG       00427    NCHAN      00430    L
00431    LL         00432    J1         00433    E          00435    JE
00436    DEL        00440    SX         00442    SY         00444    SXY
00446    SX2        00450    EN         00452    CAN        00454    FM
00456    B          00460    K

00461    IEN        00505    ICAN
```

PROGRAMMES "FINDING" et "FITTING"

```
00000          PROGRAM FINDING
00001  C       PROGRAM  SPECTR
00001          DIMENSION G(512)
00001          COMMON ICODE(2),JOC(1024),MAXCH,IMIN,IMAX,J,POS(150),KA(150)
00001          DIMENSION KB(150),AREA(150),C(210,8)
00001          DIMENSION NUM(150)
00001          DIMENSION RHE(150),IT(150),GI(150),WIDTH(150),EH(150)
00001          DIMENSION POC(150),HE(150),ELOC(150),EHE(150)
00001          DIMENSION G(8,8),U(8,8)
00001          DIMENSION A(512),X(512)
00001          DIMENSION B(8),P(8,1),LA(150),IDENT(2)
00001          EQUIVALENCE (JOC(1),D(1))
00001          ICH=512
00003    193,  WRITE(11,40)
00007     40   FORMAT(*TROUVER IDENT*)
00015          READ(10,1300)IDENT(1),IDENT(2)
00021    1200  FORMAT(A4,A4)
00034    1300  FORMAT(1X,A4,A4)
00040          PRINT 1300,IDENT(1),IDENT(2)
00047          WRITE(11,41)
00057     41   FORMAT(/*INTEG,LENT,IMIN,IMAX*)
00067          READ(10,1555)INTEG,LENT,IMIN,IMAX
00077    1555  FORMAT(2I2,2I5)
00107    1902  CALL READT(ICODE(1),3,3,NEOF,LENGHT)
00117          IF(NEOF)1904,1903,1904
00122    1903  IF(LENGHT-2)1909,1907,1909
00126    1907  IF(IDENT(1)-ICODE(1))1909,1908,1909
00132    1908  IF(IDENT(2)-ICODE(2))1909,1906,1909
00136    1906  IRUN=0
00140          CALL READT(JOC(1),512,3,NEOF,MAXCH)
00150          IF(MAXCH-512)1212,1955,1212
00154    1212  PRINT 1910,MAXCH
00161    1940  FORMAT (///' 10X* ERREUR LE RECORD D ENTREE = *I4,* ALORS QUE LE NO
00161         1MBRE MAX PREVU ETAIT 4096 * )
00210          GO TO 1935
00211    1955  IF (IMIN) 1980,1980,1981
00215    1980  IMIN=1
00217    1981  CONTINUE
00217          IF (IMAX) 17785,17785,11111
00225   17785  IMAX=MAXCH
00225    11111 CONTINUE
00225          DO 1905 I=1,512
00230          II=513-I
00232          D(II)=JOC(II)
00242    1905  CONTINUE
00247          PRINT 15552,IDENT(1),IDENT(2),MAXCH
00264   15552  FORMAT(/////,1X,A4,A4,3X,I4)
00273          PRINT 15554,LENT,IMIN,IMAX
00304   15554  FORMAT(6X,I3,I5,I5)
00311   C      SECOND DIFFERENCE FUNCTION
00311          INF=IMIN+2
00314          IM=IMAX-1
00317   15013  DO 15011 I=INF,IM
00332   15011  A(I)=D(I+1)-2.*D(I)+D(I-1)
00341          A(IMIN)=0.
00346          A(IMIN+1)=0.
00353          A(IMAX)=0.
00360          DO 15019 INT=1,INTEG
00363   C      SUBROUTINE INTEGR
00363   16000  CONTINUE
00363          LENTE=(LENT-1)/2
00367          IBOT=IMIN+LENTE+1
00375          ITOP=IMAX-LENTE
00376          DO 16001 I=IBOT,ITOP
00401          SUM=0
00403          DO 16002 J=1,LENT
00406          K=I+LENTE-LENT+J
00413   16002  SUM=SUM+A(K)
00426   16001  X(I)=SUM
00440          DO 16003 I=IBOT,ITOP
00443   16002  A(I)=X(I)
00455          LE=LENTE+1
00460          DO 16004 L=1,LE
00463          LOCD=IMIN-1+L
00477          LOCA=IMAX+1-L
00473          A(LOCD)=A(IBOT)
00503          A(LOCA)=A(ITOP)
00513   16004  CONTINUE
00520   15019  CONTINUE
```

```
C       SUBROUTINE OUTPUT
C       INITIAL PARAMETERS
        WINDOW=LENT
 1202   NA=2
 1203   NZ=10
        Y=0
        LLAMAR=0
        IMIN=IMIN+10
        J=1
        KB(J)=0
        KA(J)=0
        LA(J)=0
        LB=0
        LC=0
C       VALUES FOR FI(W)
  314   MMM=(LENT-1)/2+1
        GO TO (6000,6001,6002,6003,6004,6005,6006,6007,6008,
       26009),MMM
 6000   FACTOR=6
        GO TO 6010
 6001   FACTOR=448.
        GO TO 6010
 6002   FACTOR=5220.
        GO TO 6010
 6003   FACTOR=27342.
        GO TO 6010
 6004   FACTOR=95034.
        GO TO 6010
 6005   FACTOR=257796.
        GO TO 6010
 6006   FACTOR=592488.
        GO TO 6010
 6007   FACTOR=1209410.
        GO TO 6010
 6008   FACTOR=2258382.
        GO TO 6010
 6009   FACTOR=3934824.
 6010   CONTINUE
  208   DO 1 I=IMIN,IMAX
        X(I)=SQRT(FACTOR*D(I))/1000.
        A(I)=A(I)/1000.
C       PEAK FINDING
        IF(A(I)-X(I))3,3,2
    3   IF(A(I))4,5,5
    2   M=1
        GO TO 10
    5   M=2
        GO TO 10
    4   M=3
   10   IF(A(I-1)-X(I-1))6,6,7
  006   IF(A(I-1))8,9,9
    7   GO TO (1,11,12),M
   12   KA(J)=I
   11   LB=I-1
        GO TO 1
    8   GO TO (15,13,1),M
   15   LC=I
   13   KB(J)=I-1
        GO TO 100
    9   GO TO (14,1,16),M
   14   LA(J)=I
        GO TO 1
   16   KA(J)=I
        GO TO 1
  100   IF(KB(J)-KA(J)-NA+1)17,21,21
   21   IF(KB(J)-KA(J)-NZ+1)24,24,17
   24   IRN=0
        IRN=(KB(J)-KA(J)+1)
        RN=IRN
        QN=RN/2.
        NN=QN
        TALL=0
```

```
01047          KIN=KA(J)
01052          KFI=KB(J)
01055          DO 5000 IJ=KIN,KFI
01060          IF(A(IJ)-TALL)5001,5000,5000
01070     5001 TALL=A(IJ)
01075          MM=IJ
01077     5000 CONTINUE
01103          IF(X(LB)+1.5*D(MM))855,17,17
01120      855 FCHECK=(X(LB)*(ON+1.)/A(MM)
01125          NCHECK=FCHECK+1.5
01141          IF(NCHECK)852,852,853
01145      852 NCHECK=1
01147      853 IF(KA(J)-LB-1-NCHECK)706,706,17
01157      706 FCHECK=(ON+(1.+X(LB)*2./A(MM))
01172          MCHECK=FCHECK
01176          IF(LB-LA(J)-MCHECK)17,707,707
01205      707 J=J+1
01210          IF (J-150)17,708,708
01213       17 LA(J)=LC
01220        1 CONTINUE
01225      708 IMIN=IMIN-10
01230          IF(SENSE SWITCH 1)861,860
01232      861 LAVEL=1
01234          PRINT 19851,LAVEL
01241    19851 FORMAT(/////I2)
01245          PRINT 851,(D(K),K=IMIN,IMAX)
01267          PRINT 851,(A(K),K=IMIN,IMAX)
01311          PRINT 851,(X(K),K=IMIN,IMAX)
01333      851 FORMAT(1H1,/,(10F11.2))
01341      860 J=J-1
01344          WRITE(11,19851)J
01352          DO 30 I=1,J
01355          SUM=0.
01357          TOT=0.
01361          KIN=KA(I)
01364          KFI=KB(I)
01367          DO 31 K=KIN,KFI
01372          Z=K
01375          SUM=SUM+A(K)
01402       31 TOT=TOT+A(K)*Z
01417          AREA(I)=SUM
01424          POS(I)=TOT/SUM
01422       30 CONTINUE
01427          AMAX=0
01441          DO 700 I=1,J
01444          IF(AREA(I)-AMAX)701,700,700
01454      701 AMAX=AREA(I)
01461      700 CONTINUE
01465          CALL WRITET(IDENT(1),2,7)
01474          CALL WRITET(JOC(1),1478,7)
01502   17704 PRINT 704,LENT
01507      704 FORMAT(1H1,//////,40H ESTIMATED POSITIONS AND INTENSITIES FOR/
01507         46H LENT=I2/
01507         212H PEAK NUMBER,2X,19H POSITION (CHANNEL),2X
01507         310H INTENSITY)
01574          DO 702 I=1,J
01577          AREA(I)=AREA(I)/AMAX
01605          PRINT 703,I,POS(I),AREA(I)
01630      703 FORMAT(1H0,7X,I3,13X,F7.2,9X,F8.6)
01640          IF(SENSE SWITCH 2)18111,702
01642      702 CONTINUE
01647   18111 GO TO 1935
01650    1904 REWIND 3
01652          IF(IRUN-1)1934,1933,1934
01656    1934 IRUN = 1
01660          GO TO 1909
01661    1933 PRINT 1948,IDENT(1),IDENT(2)
01674    1948 FORMAT(//10X *LE SPECTRE *A4,A4,* N EST PAS SUR LE RUBAN*)
01710          GO TO 1935
01712          END
```

UBPROGRAMS

BCDIO	BCDIOEND	READT	FLOATFIX	COGOTO	SORTF
FIXFLOAT	WRITET	FREWIND			

ROGRAM ALLOCATION

01772	FINDING	01774	ICH	01775	INTEG	01776	LENT
01777	NEOF	02000	LENGHT	02001	IRUN	02002	I
02003	II	02004	INF	02005	IM	02006	INT
02007	LENTE	02010	IBOT	02011	ITOP	02012	SUM
02014	K	02015	LE	02016	L	02017	LOBO
02020	LOBA	02021	WINDOW	02023	NA	02024	NZ
02025	Y	02027	LLAMAR	02030	LB	02031	LC
02032	MMM	02033	FACTOR	02035	M	02036	IRN
02037	RN	02041	ON	02043	NN	02044	TALL
02046	KIN	02047	KFI	02050	IJ	02051	MM
02052	FCHECK	02054	NCHECK	02055	PCHECK	02057	MCHECK
02060	LAVEL	02061	TOT	02063	Z	02065	AMAX
02067	KB	02315	AREA	02771	C	11431	NUM
11657	PHE	12333	IT	12561	GI	13235	WIDTH
13711	EN	14365	POC	15041	HE	15515	ELOC
16171	EHE	16645	G	17045	U	17245	A
21245	X	23245	B	23265	R	23305	LA
23533	IDENT						

OMMON ALLOCATION

00000	ICODE	00002	JOC	02002	MAXCH	02003	IMIN
02004	IMAX	02005	J	02006	POS	02462	KA
00002	D						

```
00000        PROGRAM FITTING
00001        COMMON ICODE(2),D(512),MAXCH,IMIN,IMAX,J,POS(150),KA(150)
00001        DIMENSION NUM(150),BALEA(150)
00001        DIMENSION RHE(150),IT(150),GI(150),WIDTH(150),EW(150)
00001        DIMENSION POC(150),HE(150),ELOC(150),EHE(150)
00001        DIMENSION G(8,8),U(8,8),ENERG(150)
00001        DIMENSION A(512),X(512),IDENT(2)
00001        DIMENSION B(8),R(8,1),LA(150)
00001        DIMENSION KB(150),AREA(150),C(210,3)
00001  C     PEAK FITTING
00001  19851 FORMAT(I2)
00003   1935 WRITE(11,40)
00007     40 FORMAT(*TROUVER IDENT*)
00015        READ(10,1)IDENT(1),IDENT(2)
00031      1 FORMAT(A4,A4)
00034        PRINT 19852,IDENT(1),IDENT(2)
00047  19852 FORMAT(1X,A4,A4)
00053        AMAN=D(2)/1000.
00056        BAMAN=D(1)/(8192.*1000.)
00064        CAMAN=0
00067        SENSE LIGHT ISL
00071        INCHOA=0
00073        JA=0
00075   1909 CALL READT(ICODE(1),3,7,NEOF,LENGHT)
00105        IF(NEOF)1904,1903,1904
00110   1903 IF(LENGHT-2)1909,1907,1909
00114   1907 IF(IDENT(1)-ICODE(1))1909,1906,1909
00120   1906 IF(IDENT(2)-ICODE(2))1909,1903,1909
00124   1903 IRUN=0
00126        DO 240 I=1,150
00131        POC(I)=0.
00136        ENERG(I)=0.
00143        BALEA(I)=0.
00150        ELOC(I)=0.
00155        HE(I)=0.
00162        EHE(I)=0.
00167        IT(I)=0.
00173        GI(I)=0.
00200        WIDTH(I)=0.
00205        EW(I)=0.
00212        NUM(I)=0.
00216    240 CONTINUE
00223        CALL READT(D(1),1478,7,NEOF,LENGHT)
00233        IF (IMIN) 1980,1980,1981
00237   1980 IMIN=1
00241   1981 CONTINUE
00241   196. ANCHO=INCHOA
00244   1968 DO 498 I=IMIN,IMAX
00247        A(I)=0.
00254        IF(D(I))856,856,498
00263    856 D(I)=D(I-1)
00270    498 CONTINUE
00275        NFUN=0
00277        IMAXCH = MAXCH
00301        FWHM=ANCHO
00303        IF(JA-J) 6969,6969,6966
00310   6969 IF(JA) 6966,6966,6970
00314   6966 DO 1502 I=1,J
00317        GO TO 6971
00320   6970 I=JA
00322   6971 IF(NFUN) 527,528,527
00325    528 LL=0
00327        FWHM=FWHM+2.
00332        IFWHM=FWHM
00335        INTF=5*IFWHM
00340        ERQ=.1
```

```
[illegible]
[illegible]
[illegible]
[illegible]
[illegible]
[illegible]
[illegible]
00425     502 KIN=IPOS-INTF
00400         KFI=IPOS+INTF
00402     550 INFUN=1
00403         NPAR=6
00407         GO TO 504
00410     503 KIN=IPOS-INTF
00413         JPOS=0
00415         JPOS=POS(I+1)
00423         KFI=JPOS+INTF
00426         INFUN=2
00430         NPAR=3
00432     504 IF (KFI-IMAXCH+8) 22,22,401
00440     401 KFI = IMAXCH - 8
00442      22 IF ( KIN-2 ) 23,400,400
00450      23 KIN = 1
00452     400 QIN=0.
00454         QIN=KIN
00457         WIDE=KFI-KIN+1
00464  C      ESTIMATE OF IN.PARAM.FOR FITTING
00464         B(6)=0.
00466         B(5)=(D(KFI-1)+D(KFI)+D(KFI+1)-D(KIN-1)-D(KIN)-
00466        2D(KIN+1))/(3.*WIDE)
00507         B(4)=(D(KIN-1)+D(KIN)+D(KIN+1)+D(KFI-1)+D(KFI+1)+
00507        2D(KFI))/6.
00525         B(3)=FWHM
00527         B(2)=POS(I)
00534         B(1)=D(IPOS)-B(4)
00542         IF(SENSE SWITCH 1)863,862
00544     863 LAVEL=2
00546         PRINT 19851,LAVEL
00552         PRINT 499,KIN,KFI,INTF,KA(I)
00571     499 FORMAT(1H1,4I8//)
00575     862 GO TO (505,506),INFUN
00602     506 B(7)=D(JPOS)-D(KFI)
00613         B(8)=POS(I+1)
00620     505 IF(SENSE SWITCH 1)865,864
00622     865 LAVEL=3
00624         PRINT 19851,LAVEL
00631         PRINT 600,B
00637     600 FORMAT(10X,8F12.3)
00643  C      DEFINITION OF THE FITTING FUNCTION
00643     864 DO 507 L=KIN,KFI
00646         K=L-KIN+1
00652         CH=0.
00654         CH=L
00657         ZA=CH-B(2)
00662         ZB=1.6651092*ZA/B(3)
00666         EXA=EXPF(-ZB*ZB)
00676         A(L)=B(1)*EXA+B(4)+B(5)*ZA+B(6)*ZA*ZA
00716         GO TO (508,509),INFUN
00723     509 ZC=CH-B(8)
00726         ZD=1.6651092*ZC/B(3)
00732         EXB=EXPF(-ZD*ZD)
00742         A(L)=A(L)+EXB*B(7)
00751         C(K,7)=EXB
00756         C(K,8)=B(7)*EXB*3.3302184*ZD/B(3)
00767         IF(SENSE LIGHT 1)601,602
00773     602 PRINT 19853
00776   19853 FORMAT(1H0)
01001     601 SENSE LIGHT ISL
01003     508 C(K,1)=EXA
01010         C(K,2)=B(1)*EXA*3.3302184*ZB/B(3)-B(5)-4.*B(6)*B(6)*ZA
01032         C(K,3)=C(K,2)*ZA/B(3)
01041         C(K,4)=1.
01046         C(K,5)=ZA
01053         C(K,6)=ZA*ZA
01061     507 CONTINUE
```

```
01066  C      LEAST SQUARE FITTING
01066          DO 530 L=1,NPAR
01071          R(L,1)=0.
01076          DO 531 K=KIN,KFI
01101          M=K-KIN+1
01105    531   R(L,1)=R(L,1)+C(M,L)*(1.-A(K)/D(K))
01136    530   CONTINUE
01143          DO 510 L=1,NPAR
01146          DO 511 N1=1,NPAR
01151          G(L,N1)=0.
01161          DO 512 K=KIN,KFI
01164          M=K-KIN+1
01170    512   G(L,N1)=G(L,N1)+C(M,L)*C(M,N1)/D(K)
01235    511   CONTINUE
01242    510   CONTINUE
01247          NM=1
01251          KEIMP=I
01253          CALL MATINV(G,NPAR,R,NM,DETERM)
01261          I=KEIMP
01263          IWIDE=WIDE
01266          DO 520 L=1,NPAR
01271          SPRT=0.
01273          SPRT=G(L,L)*01/FLOAT(IWIDE-NPAR-1)
01314          IF(SPRT)19520,520,520
01320  19520  SPRT=0.
01322    520   U(L,1)=SQRT(SPRT)
01340          IF(SENSE SWITCH 1)867,866
01342    867   LAVEL=4
01344          PRINT 19851,LAVEL
01351          PRINT 600,(U(L,L),L=1,8)
01375    866   01=0.
01377          DO 513 K=KIN,KFI
01402          01=01+(D(K)-A(K))**2/D(K)
01415    513   CONTINUE
01422          IF(R(1))300,300,1492
01426   1492   IF(B(2))300,300,1493
01432   1493   CONTINUE
01472    106   Q=ABS(QQ-01)
01440          QQ=01
01442          LL=LL+1
01445          IF(SENSE SWITCH 1)869,868
01447    869   LAVEL=5
01451          PRINT 19851,LAVEL
01456          PRINT 604,LL,QQ,Q
01467    604   FORMAT(I6,2F14.4)
01473    868   IF(Q-ERO)514,514,515
01500    515   IF(LL-20)516,525,525
01505    516   DO 517 L=1,NPAR
01510          B(L)=B(L)+R(L,1)
01516    517   CONTINUE
01523          GO TO 505
01524    525   IF(SENSE SWITCH 1)872,300
01536    872   LAVEL=6
01520          PRINT 19851,LAVEL
01525          PRINT 526,I
01542    526   FORMAT(54H MAXIMUM NUMBER OF ITERATIONS EXCEEDED IN FITTING PEAKI4
01542         2///)
01563    300   IF(FWHM-10)528,301,301
01570    301   FWHM=ANCHO
01572          GO TO 501
01573  C      STORAGE OF THE FINAL PARAMETERS
01573    514   POS(I)=B(2)
01600          ENERG(I)=AMAN+BMAN*B(2)+CMAN*B(2)*B(2)
01614          DELEA(I)=1.004*B(3)*B(1)
01622          ELOC(I)=U(2,2)
01630          HE(I)=B(1)
01635          ENE(I)=U(1,1)
01642          IT(I)=LL
01645          GI(I)=01
01652          WIDTH(I)=B(3)
01657          EW(I)=U(3,3)
01664          NUM(I)=IWIDE
01667          FWHM=ANCHO
```

```
      IF(SENSE SWITCH 1)871,871
  871 LAVEL=7
      PRINT 19851,LAVEL
      PRINT 523,I,B(3),U(3,3),B(7),U(7,7)
  523 FORMAT(1H PEAK NUMBER=I5/10H POSITION=F8.2,10X,7H ERROR=F7.3/8H H
     2EIGHT=F11.3,10X,7H ERROR=F11.3//)
  870 GO TO (521,522),INFUN
  522 NFUN=1
      GO TO 501
  527 NFUN=0
      POC(I)=B(8)
      ENERG(I)=AMAN+BAMAN*B(3)+CAMAN*B(8)*B(8)
      BALEA(I)= 1.064*B(3)*B(7)
      ELOC(I)=U(8,8)
      HE(I)=B(7)
      EHE(I)=U(7,7)
      IT(I)=LL
      GI(I)=Q1
      WIDTH(I)=B(3)
      FW(I)=U(3,3)
      NUM(I)=TWIDE
      IF(SENSE SWITCH 1)873,501
  873 LAVEL=8
      PRINT 19851,LAVEL
      PRINT 523,I,B(3),U(8,8),B(7),U(7,7)
  521 IF(SENSE SWITCH 1)874,501
  874 LAVEL=9
      PRINT 19851,LAVEL
      PRINT 524,B,KIN,KFI,LL,Q1
  524 FORMAT(15H PARAMETERS ARE/8F11.3/5H KIN=I5/5H KFI=I5/4H LL=I5/4H Q
     21=F6.0///)
      DO 200 KI=KIN,KFI
  200 CONTINUE
      KKK=KFI-KIN+1
  501 CONTINUE
      IF (JA-J) 2000,2000,2001
 2000 IF(JA) 2001,2001,2002
 2001 CONTINUE
 1002 CONTINUE
 2002 CONTINUE
C     PRINT OUT OF RESULTS
      HMAX=0.
      DO 710 I=1,J
      IF(HE(I)-HMAX)710,710,711
  711 HMAX=HE(I)
  710 CONTINUE
      DO 712 I=1,J
  712 RHE(I)=HE(I)/HMAX
      PRINT 18731
18731 FORMAT(///)
      PRINT 713,IDENT(1),IDENT(2)
  713 FORMAT(54H POSITION,INTENSITY AND WIDTH OF THE PEACKS IN THE RUN
     2A4,A4/)
      PRINT 714
  714 FORMAT(117H PEAK NUMBER  POSITION AND ERROR  ENERGY  HEIGHT AND ER
     2ROR RELATIVE  FWHM AND ERROR  XI  NO OF IT  NO OF POINTS  AREA//)
      DO 715 I=1,J
  715 PRINT 716,I,POC(I),ELOC(I),ENERG(I),HE(I),EHE(I),RHE(I),WIDTH(I),E
     2W(I),GI(I),IT(I),NUM(I),BALEA(I)
  716 FORMAT(4X,I3,7X,F8.3,4X,F6.3,2X,F6.3,2X,F7.0,2X,F7.0,2X,F6.4,3X,F5
     2.2,4X,F5.2,1X,F4.0,4X,I2,9X,I3,5X,F10.1)
      PRINT 31724
31724 FORMAT(//)
      GO TO 1935
 1904 REWIND 7
      IF(IRUN-1)1934,1933,1934
 1934 IRUN=1
      GO TO 1909
 1933 PRINT 1948,IDENT(1),IDENT(2)
 1948 FORMAT(///10X* LE SPECTRE*A4,A4,*N EST PAS SUR LE RUBAN*)
      GO TO 1935
      END
```

SUBPROGRAMS

BCDIO	BCDIOEND	FLOATFIX	SLIGHT	REMDT	FIXFLOAT
COMGOTO	EXPF	IFSLIGHT	MATINV	FLOAT	SQRT
ABS	REWIND				

PROGRAM ALLOCATION

02727	FITTING	02731	AMAN	02733	BAMAN	02735	CAMAN
02737	CSL	02740	INCIOA	02741	JA	02742	NCNF
02743	LOWGHT	02744	IMUN	02745	I	02746	ANCHO
02750	NFUN	02751	IMAXCH	02752	FWHM	02754	LL
02755	IFWHM	02756	INTF	02757	EPQ	02761	QQ
02762	IPOS	02764	KIN	02765	KFI	02766	INFUN
02767	NPAR	02770	JPOS	02771	QIN	02773	WIDE
02775	LMVEL	02776	L	02777	K	03000	CH
03002	ZO	03004	ZB	03006	EXA	03010	ZC
03012	ZD	03014	EXB	03016	M	03017	N1
03020	MM	03021	KEIMP	03022	DETERM	03024	IWIDE
03025	SPRT	03027	Q1	03031	Q	03033	KI
03034	KKK	03035	HMAX				
03037	NUM	03265	DALFA	03741	RHE	04415	IT
04643	GI	05317	WIDTH	05773	EM	06447	POC
07123	HE	07577	FLOC	10253	EHE	10727	G
11127	U	11327	ENERG	12003	A	14003	X
15003	IDENT	16005	B	16025	R	16045	LA
16073	KB	16521	AREA	17175	C		

COMMON ALLOCATION

00000	ICODE	00002	D	02002	MAXCH	02003	IMIN
02004	IMAX	02005	J	02006	POS	02462	KA

```
00000          SUBROUTINE MATINV(A1,N1,B1,M,DETERM)
00010          DIMENSION IPIVOT(8),A1(8,8),B1(8,1),INDEX(8,2),PIVOT(8)
00010          EQUIVALENCE (IROW,JROW), (ICOLUM,JCOLUM),(AMAX,T,SWAP)
00010       10 DETERM=1.0
00012       15 DO 20 J=1,N1
00015       20 IPIVOT(J)=0
00025       30 DO 550 I=1,N1
00030       40 AMAX=0.0
00032       45 DO 105 J=1,N1
00035       50 IF (IPIVOT(J)-1) 60,105,60
00042       60 DO 100 K=1,N1
00045       70 IF (IPIVOT(K)-1) 80,100,740
00053       80 IF(ABS(AMAX)-ABS(A1(J,K))) 85,100,100
00100       85 IROW=J
00102       90 ICOLUM=K
00104       95 AMAX=A1(J,K)
00116      100 CONTINUE
00123      105 CONTINUE
00130      110 IPIVOT(ICOLUM)=IPIVOT(ICOLUM)+1
00134      130 IF (IROW-ICOLUM) 140,260,140
00140      140 DETERM=-DETERM
00142      150 DO 200 L=1,N1
00145      160 SWAP=A1(IROW,L)
00157      170 A1(IROW,L)=A1(ICOLUM,L)
00202      200 A1(ICOLUM,L)=SWAP
00222      205 IF(M) 260,260,210
00226      210 DO 250 L=1,M
00231      220 SWAP=B1(IROW,L)
00243      230 B1(IROW,L)=B1(ICOLUM,L)
00266      250 B1(ICOLUM,L)=SWAP
00306      260 INDEX(I,1)=IROW
00311      270 INDEX(I,2)=ICOLUM
00314      310 PIVOT(I)=A1(ICOLUM,ICOLUM)
00331      320 DETERM=DETERM*PIVOT(I)
00337      330 A1(ICOLUM,ICOLUM)=1.0
00352      340 DO 350 L=1,N1
00355      350 A1(ICOLUM,L)=A1(ICOLUM,L)/PIVOT(I)
00411      355 IF(M) 380,380,360
00415      360 DO 370 L=1,M
00420      370 B1(ICOLUM,L)=B1(ICOLUM,L)/PIVOT(I)
00454      380 DO 550 L1=1,N1
00457      390 IF(L1-ICOLUM) 400,550,400
00463      400 T=A1(L1,ICOLUM)
00475      420 A1(L1,ICOLUM)=0.0
00510      430 DO 450 L=1,N1
00513      450 A1(L1,L)=A1(L1,L)-A1(ICOLUM,L)*T
00560      455 IF(M) 550,550,460
00564      460 DO 500 L=1,M
00567      500 B1(L1,L)=B1(L1,L)-B1(ICOLUM,L)*T
00634      550 CONTINUE
00646      600 DO 710 I=1,N1
00651      610 L=N1+1-I
00655      620 IF(INDEX(L,1)-INDEX(L,2)) 630,710,630
00662      630 JROW=INDEX(L,1)
00665      640 JCOLUM=INDEX(L,2)
00670      650 DO 705 K=1,N1
00673      660 SWAP=A1(K,JROW)
00705      670 A1(K,JROW)=A1(K,JCOLUM)
00730      700 A1(K,JCOLUM)=SWAP
00743      705 CONTINUE
00750      710 CONTINUE
00755      740 RETURN
00757          END
```

UBPROGRAMS

ABS

RCGRAM ALLOCATION

01000	MATINV	01007	J	01010	I	01004	AMAX
01011	K	01002	IROW	01003	ICOLUM	01012	L
01004	SWAP	01013	L1	01004	T	01002	JROW
01003	JCOLUM						
01014	IPIVOT	01024	INDEX	01044	PIVOT		

PROGRAMME SIGMA

```
00000         PROGRAM SIGMA
00001         DIMENSION WK(100),WL(100)
00001         COMMON X(100),Y(100),A(100),U(100),UL(10[illegible] (100,2),N,D,AY
00001         INTEGER ELEMENT,EC
00001         INTEGER CC,TAB
00001         READ(1,1)N,X(1),D
00021       1 FORMAT(I5,2F10.4)
00021         READ (1,2)(Y(I),I=1,N)
00047       2 FORMAT(10F8.2)
00047         READ (1,15)(A(I),I=1,100)
00072         READ (1,15)(U(I),I=1,100)
00115         READ (1,15)(UL(I),I=1,100)
00140         READ (1,15)(WK(I),I=1,100)
00163         READ (1,15)(WL(I),I=1,100)
00206      15 FORMAT(10F8.4)
00211         READ (1,23)(TAB(I,1),I=1,100)
00232      23 FORMAT(26R3)
00235         READ (1,24)(TAB(I,2),I=1,100)
00256      24 FORMAT(26I3)
00261         I=1
00263      32 IF(TAB(I,1)-TAB(I+1,1))26,26,22
00271      22 J=TAB(I,1)
00274         K=TAB(I,2)
00277      30 TAB(I,1)=TAB(I+1,1)
00302         TAB(I,2)=TAB(I+1,2)
00305         I=I+1
00310         IF(J-TAB(I+1,1))31,31,30
00316      31 TAB(I,1)=J
00321         TAB(I,2)=K
00324      26 I=I+1
00327         IF(I-100)32,33,33
00334      33 CONTINUE
00334      17 WRITE(11,25)
00340      25 FORMAT(//*           NATURE DU FAISCEAU*/*           ELEMENT=*)
00357         READ(10,27)ELEMENT
00365      27 FORMAT(R3)
00367         WRITE(11,28)
00373      28 FORMAT(*           CHARGE CC=*)
00402         READ(10,29)CC
00410      29 FORMAT(I2)
00412         WRITE(11,35)
00416      35 FORMAT(*           ENERGIE TOTALE(MEV)  E=*)
00431         READ(10,36)E
00437      36 FORMAT(F10.4)
00442         CALL DICTAB(ELEMENT,TAB(1,1),100,I)
00451      55 WRITE(11,46)
00455      46 FORMAT(//*           ELEMENT DE LA CIBLE*/10X,*EC=*)
00472         READ(10,27)EC
00500         CALL DICTAB(EC,TAB(1,1),100,K)
00507         Z=1000*E/(A(I)*U(K))
00524         W=1000*E/(A(I)*UL(K))
00541         CALL INTERP (Z)
00543         SK=2.*AY*CC*CC/(U(K)*U(K))
00565         SKX=SK*WK(K)
00573         CALL INTERP (W)
00575         SL=8.*AY*CC*CC/(UL(K)*UL(K))
00617         SLX=SL*WL(K)
00625         WRITE (11,75) SK,SL
00635      75 FORMAT(//*           SIGMAK=*,E10.4,10X,*SIGMAL=*,E10.4)
00653         WRITE (11,76)SKX,SLX
00663      76 FORMAT (10X,*SIGMAK RX=*,E10.4,7X,*SIGMAL RX=*,E10.4)
00700         GO TO 55
00701         END

UBPROGRAMS
 BCDIO      BCDIOEND   DICTAB     INTERP     QSQFLOAT

ROGRAM ALLOCATION

00727    SIGMA      00731    I          00732    J          00733    K
00734    ELEMENT    00735    CC         00736    E          00740    EC
00741    Z          00743    W          00745    SK         00747    SKX
00751    SL         00753    SLX

00755    WK         01265    WL .

OMMON ALLOCATION

00000    X          00310    Y          00630    A          01130    U
01440    UL         01750    TAB.       02260    N          02261    D
02263    AY
```

```
00000          SUBROUTINE DICTAB(ELEM,TABLE,N,RESUL)
00010          DIMENSION TABLE(100,2)
00010          INTEGER ELEM,RESUL
00010          INTEGER TABLE
00010          I=1
00012          J=N
00014       10 IF(I-J)90,100,150
00021       90 K=(I+J)/2
00025          IF(TABLE(K,1)-ELEM)60,120,50
00036       60 I=K+1
00041          GO TO 10
00042       50 J=K-1
00045          GO TO 10
00046      100 IF(TABLE(I,1)-ELEM)150,110,150
00056      110 K=I
00060      120 RESUL=TABLE(K,2)
00066          RETURN
00070      150 WRITE(11,200)
00074      200 FORMAT(//*           ELEMENT NON EXISTANT*)
00106          END

UDPROGRAMS
 BCDIO      BCDIOEND
ROGRAM ALLOCATION
00120    DICTAB    00122    I         00123    J         00124    K
```

```
00000          SUBROUTINE INTERP(Z)
00005          COMMON X(100),Y(100),A(100),U(100),UL(100),TAB(100,2),N,D,AY
00005          INTEGER TAB
00005          IF(Z-X(1))110,115,120
00012     120  IF(Z-X(N))125,115,110
00025     125  DO  50   J=2,N
00026          X(J)=X(1)+(J-1)*D
00037          IF(Z-X(J))130,115,50
00047      50  CONTINUE
00054     130  X(J-2)=X(1)+(J-3)*D
00065          X(J-1)=X(1)+(J-2)*D
00076          X(J+1)=X(1)+J*D
00106          K1=ABS(Z-X(J-1))
00120          K2=ABS(Z-X(J))
00132          IF  (K1-K2)135,140,140
00137     135  J1=J-2
00142          J2=J-1
00145          J3=J
00147          GO TO 145
00150     140  J1=J-1
00153          J2=J
00155          J3=J+1
00160     145  DET=X(J3)*(X(J2) **2-X(J1)**2)+X(J2)*(X(J1)**2-X(J3)**2)+X(J1)*
00160         C(X(J3) **2-X(J2)**2)
00263          AA=(X(J3)*(Y(J2)-Y(J1))+X(J1)*(Y(J3)-Y(J2))+X(J2)*(Y(J1)-Y(J3)))/D
00263         CET
00327          B=(Y(J3)*(X(J2)**2-X(J1)**2)+Y(J2)*(X(J1)**2-X(J3)**2)+Y(J1)*(X(J3
00327         C)**2-X(J2)**2))/DET
00433          C=(Y(J1)*X(J2)*X(J3)*(X(J2)-X(J3))-Y(J2)*X(J1)*X(J3)*(X(J1)-X(J3))
00433         C+Y(J3)*X(J1)*X(J2)*(X(J1)-X(J2)))/DET
00540          AY=(AA*Z+B)*Z+C
00546          GO TO 100
00547     115  WRITE(11,150)Z,Y(J)
00566     150  FORMAT(F10.4,E10.4)
00573          GO TO 100
00574     110  WRITE(11,160)
00600     160  FORMAT(10X,21HDEPASSEMENT D"ECHELLE,//)
00612          AY=0.
00614     100  CONTINUE
00614          RETURN
00616          END
```

UBPROGRAMS

```
 QBQFLOAT    ABS          FIXFLOAT    BCDIO       BCDIOEND
```

ROGRAM ALLOCATION

```
00654    INTERP    00655    J         00656    K1        00657    K2
00660    J1        00661    J2        00662    J3        00663    DET
00665    AA        00667    B         00671    C
```

OMMON ALLOCATION

```
00000    X         00310    Y         00620    A         01130    [illegible]
01440    UL        01750    TAB       02260    N         02261    [illegible]
02263    AY
```

PROGRAMME CONCENT B

```
00000          PROGRAM CONCENTB
00001          DIMENSION C(10,10),R(10,10),ALPHA(10,10),RALPHA(10,10),B(10,10)
00001        .   DIMENSION RI(10),CI(10)
00001          WRITE(11,31)
00005       31 FORMAT(* N=*)
00010          READ(10,1)N
00016          WRITE(11,32)
00022       32 FORMAT(22HCONCENTRATIONS CONNUES)
00022          READ(10,2)((C(I,J),I=1,N),J=1,N)
00067          WRITE(11,33)
00073       33 FORMAT(18HINTENSITES CONNUES)
00102          READ(10,2)((R(I,J),I=1,N),J=1,N)
00137        1 FORMAT(I3)
00141        2 FORMAT(F6.4)
00144          DO 10 I=1,N
00147          DO 20 J=1,N
00152          B(I,J)=C(I,J)/R(I,J)
00177       20 CONTINUE
00204       10 CONTINUE
00211          CALL MATINV(C,N,B,N)
00716          DO 25 I=1,N
00721          DO 25 J=1,N
00724          ALPHA(I,J)=B(J,I)
00241       25 WRITE(13,3)ALPHA(I,J)
00270        3 FORMAT(12H ALPHA(I,J)=,5F10.4)
00277          WRITE(11,34)
00303       34 FORMAT(19HINTENSITES MESUREES)
00312          READ(10,2)(RI(I),I=1,N)
00335          DO 50  J=1,N
00340       50 RALPHA(1,J)=1
00355          DO 70 I=2,N
00360          DO 70 J=1,N
00363       70 RALPHA(I,J)=0
00406          DO 100 I=2,N
00411          DO 100 J=1,N
00414          IF(I-J)40,60,40
00420       60 RALPHA(I,J)=-1
00433       40 RALPHA(I,J)=RALPHA(I,J)+ALPHA(I,J)*RI(I)
00463      100 CONTINUE
00475          DO 500 I=1,N
00500          IF(I-1)75,80,75
00504       80 CI(I)=1
00512          GO TO 500
00513       75 CI(I)=0
00521      500 CONTINUE
00526          CALL MATINV(RALPHA,N,CI,1)
00533          DO 300 I=1,N
00536      300 WRITE(13,4)CI(I)
00556        4 FORMAT(7H CI(I)=,5F10.4)
00564          END

UNPROGRAMS
 BCDIO      BCDIOEND   MATINV     FLOATFIX

ROGRAM ALLOCATION
00600    CONCENTB  00602    N         00601    I         00604    J

00605    C         01115    R         01425    ALPHA     01735    RALPHA
02245    B         02555    RI        02601    CI
```

```
00000       SUBROUTINE MATINV(A,N,B,M)
00010 C
00010 C     MATRIX INVERSION WITH ACCOMPANYING SOLUTION OF LINEAR EQUATIONS
00010 C
00010 C
00010       DIMENSION IPIVOT(10),A(10,10),B(10,10),INDEX(10,2),PIVOT(10)
00010 C
00010       EQUIVALENCE (IROW,JROW), (ICOLUM,JCOLUM), (AMAX, T, SWAP)
00010 C
00010 C     INITIALIZATION
00010 C
00010    15 DO 20 J=1,N
00013    20 IPIVOT(J)=0
00022    30 DO 550 I=1,N
00076 C
00026 C     SEARCH FOR PIVOT ELEMENT
00026 C
00026    40 AMAX=0.0
00030    45 DO 105 J=1,N
00033    50 IF (IPIVOT(J)-1) 60, 105, 60
00040    60 DO 100 K=1,N
00043    70 IF (IPIVOT(K)-1) 80, 100, 740
00051    80 IF (ABS (AMAX)-ABS (A(J,K))) 85, 100, 100
00076    85 IROW=J
00100    90 ICOLUM=K
00102    95 AMAX=A(J,K)
00114   100 CONTINUE
00121   105 CONTINUE
00126   110 IPIVOT(ICOLUM)=IPIVOT(ICOLUM)+1
00132 C
00132 C     INTERCHANGE ROWS TO PUT PIVOT ELEMENT ON DIAGONAL
00132 C
00132   130 IF(IROW-ICOLUM)150,260,150
00136   150 DO 200 L=1,N
00141   160 SWAP=A(IROW,L)
00153   170 A(IROW,L)=A(ICOLUM,L)
00176   200 A(ICOLUM,L)=SWAP
00216   205 IF(M) 260, 260, 210
00222   210 DO 250 L=1, M
00225   220 SWAP=B(IROW,L)
00237   230 B(IROW,L)=B(ICOLUM,L)
00262   250 B(ICOLUM,L)=SWAP
00302   260 INDEX(I,1)=IROW
00305   270 INDEX(I,2)=ICOLUM
00310   310 PIVOT(I)=A(ICOLUM,ICOLUM)
00325 C
00325 C     DIVIDE PIVOT ROW BY PIVOT ELEMENT
00325 C
00325   330 A(ICOLUM,ICOLUM)=1.0
00340   340 DO 350 L=1,N
00343   350 A(ICOLUM,L)=A(ICOLUM,L)/PIVOT(I)
00377   355 IF(M) 390, 380, 360
00403   360 DO 370 L=1,M
00406   370 B(ICOLUM,L)=B(ICOLUM,L)/PIVOT(I)
00442 C
00442 C     REDUCE NON-PIVOT ROWS
00442 C
00442   380 DO 550 L1=1,N
00445   390 IF(L1-ICOLUM) 400, 550, 400
00451   400 T=A(L1,ICOLUM)
00463   420 A(L1,ICOLUM)=0.0
00476   430 DO 450 L=1,N
00501   450 A(L1,L)=A(L1,L)-A(ICOLUM,L)*T
00546   455 IF(M) 550, 550, 460
00552   460 DO 500 L=1,M
00555   500 B(L1,L)=B(L1,L)-B(ICOLUM,L)*T
00622   550 CONTINUE
```

```
00634  C
00674  C     INTERCHANGE COLUMNS
00534  C
00624     600 DO 710 I=1,N
00627     610 L=N+1-I
00643     620 IF (INDEX(L,1)-INDEX(L,2)) 630, 710, 630
00650     630 JROW=INDEX(L,1)
00653     640 JCOLUM=INDEX(L,2)
00656     650 DO 705 K=1,N
00661     660 SWAP=A(K,JROW)
00673     670 A(K,JROW)=A(K,JCOLUM)
00716     700 A(K,JCOLUM)=SWAP
00731     705 CONTINUE
00736     710 CONTINUE
00743     740 RETURN
00745         END
```

```
UBPROGRAMS
 ABS
ROGRAM ALLOCATION
00773     NATINV    00774     J         00775     I         00776     AMAX
00778     K         00767     IROW      00770     ICOLUM    00777     L
00771     SWAP      01000     L1        00771     I         00767     JROW
00770     JCOLUM
01001     IPIVOT    01013     INDEX     01037     PIVOT
```

Dernière page d'une thèse

VU

Grenoble, le 28 Novembre 1973

Le Président de la thèse

J. VALENTIN

VU, et permis d'imprimer,

Grenoble, le

Le Président de l'Université
Scientifique et Médicale

Dernière page d'une thèse

VU

Grenoble, le 26 Novembre 1973

Le Président de la thèse

J. VALENTIN

VU, et permis d'imprimer,

Grenoble, le

Le Président de l'Université
Scientifique et Médicale